

Terence Kristinkovics
Duss Frankfurt am Main
1904

Begründung der semiklassischen Näherung
mittels Pfadintegral-Methoden

Inaugural-Dissertation
zur
Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften
vorgelegt beim Fachbereich Physik der
Johann-Wolfgang-Goethe-Universität
in Frankfurt am Main

von

Ferenc Krisztinkovics

aus

Bakonycsérnye - Ungarn

Frankfurt am Main

1984

Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereiches Physik der
Johann-Wolfgang-Goethe-Universität Frankfurt am Main

Dekan:	Prof. Dr. F. Granzer
Erster Berichterstatter:	Prof. Dr. W. Greiner
Zweiter Berichterstatter:	Prof. Dr. B. Müller

Tag der Promotion: 3. Juli 1984

Inhaltsverzeichnis

	Seite
1. Einleitung und Motivation	1
2. Einführung des quantenmechanischen Propagators	7
2.1 Darstellungsarten des Propagators	9
2.2 Der exakte quantenmechanische Fall	11
2.2.1 Über die wesentlichen Eigenschaften des Propagators	15
2.2.2 Explizite Formeln	19
2.3 Pfadintegraldarstellung für den Propagator im Phasenraum	22
2.4 Die S-Matrix	24
2.5 Der extrem klassische Grenzfall ($\hbar=0$)	27
3. Über die Problemformulierung des - durch ein klassisches oder quantenmechanisches System - gestörten Quantenobjektes	29
3.1 Ein kleiner geschichtlicher Überblick	35
4. Semiklassische Behandlung der exklusiven bzw. inklusiven Übergänge, Bahnbewegungen und Übergangswahrscheinlichkeiten durch den Feynman-Pfadintegralformalismus	37
4.1 Definition und allgemeine Eigenschaften des Einflußfunktionals	40
4.2 Die Methode von P. Pechukas	43
4.3 Die Methode des Feynman-Einflußfunktionals	48
4.3.1 Formulierung durch die Lagrangefunktion	48
4.3.2 Formulierung durch die Hamiltonfunktion	50
4.3.3 Eigenschaften	51
4.4 Semiklassische Betrachtung der inklusiven Übergangswahrscheinlichkeit	
- Klassische Bewegungsgleichung der Observablen	
- Schrödingergleichung der Bad-Variablen	52
4.4.1 Das Modell von Pechukas	53

4.4.2	Unsere klassischen Bewegungsgleichungen	54
4.4.3	Die inklusive (bzw. exklusive) Übergangswahrscheinlichkeit (Der semiklas- sische Grenzfall des Propagators ($\hbar \rightarrow 0$))	57
4.4.4	Die Verteilung der Observablen im Endzustand	61
5.	Die Berechnung eines Modells	63
5.1	Das Modell für Streuung eines Teilchens auf einen Vibratorkern	63
5.2	Die Beschreibung des Oszillatorsystems	66
5.3	Formulierung des Modells von Pechukas	67
5.3.1	Die Lösung des Modells	68
5.3.2	Die (exklusiven) Übergangswahrscheinlichkeiten des Vibrators	70
5.3.3	Asymptotische Ausdrücke für die rückwirkungs- freien Lösungen	71
6.	Verschiedene Betrachtungsmethoden der Anregung eines Vibrators durch Streuungen (Zusammen- fassung, Überblick und Diskussion)	74
6.1	Klassische Betrachtung	74
6.2	Semiklassische - nicht selbstkonsistente - Behandlung des Streuproblems	77
6.3	Wellenmechanische Betrachtung dieses Streu- Problems	82
7.	Diskussion der numerischen Ergebnisse	86
7.1	Über die Lösungsmethode der Gleichungen des Problems	86
7.2	Über die numerischen Ergebnisse	89
7.2.1	Diskussion der Tabelle	89
7.2.2	Diskussion über die Bilder	91
8.	Anhang Über die Methode der stationären Phasen	96
9.	Tabelle- und Figurenbeschreibung	100
	Tabelle	103
	Figuren	104
	Lebenslauf	113
	Danksagung	115
	Literaturverzeichnis	117

1. Einleitung und Motivation

In den letzten 15 Jahren ist das theoretische, aber auch experimentelle Interesse an den Reaktionen zwischen (schweren) komplexen Teilchen in zahlreichen Gebieten der Physik gewachsen (Greif. 83), (Re. 84).

Beispiele lassen sich anführen aus den Bereichen Oberflächen-, Atom- und Molekülphysik über tiefinelastische Schwerionenreaktionen bis hin zu Riesenkernsystemen (Ham. 83), (Weid. 80).

In dieser Arbeit befassen wir uns mit dem Schwerionenstoß. Gegenstand vieler theoretischer und berechnungstechnischer Untersuchungen in diesem Gebiet der Physik ist es, eine allgemeine theoretische Beschreibung für solche Stoßprozesse mit Kernkontakt anzugeben. Infolge dieser Forschungen sind in den letzten Jahren viele verschiedene Approximationsmethoden entwickelt worden.

Soweit es uns bekannt ist, gibt es zur Zeit nur eine einzige Beschreibung (He. 83 a, b, c), die dem Anspruch genügt, diese Stoßprozesse in einer einheitlichen und allgemeinen theoretischen Behandlung zu formulieren. In dieser Beschreibung ist auch die Relativbewegung der Kerne zunächst völlig quantenmechanisch behandelt worden, sowohl ihr Einfluß auf die elektronischen Ereignisse als auch auf die inneren Kernanregungen. Die infolge dieser Wechselwirkung zwischen den atomaren und kernphysikalischen Prozessen entstehenden Interferenzphänomene bilden einen weiteren Gegenstand des - bei nahe seit 20 Jahren andauernden - Interesses.

Die Struktur des völlig quantenmechanischen Formalismus (He. 83 a, b, c) ermöglicht durch die JWKB-Näherung einen Übergang zur Semiklassik, folglich ergibt sich die Möglichkeit, die quantenmechanischen und eine



semiklassische (JWKB) Formulierung zu vergleichen.

Der Zweck unserer Untersuchung (im Gegensatz zu den oben genannten Methoden) ist, eine technisch einheitliche semiklassische Behandlung zu finden, um die Stoßprozesse zwischen Schwerionen zu beschreiben. Dabei soll von einer vollständigen quantenmechanischen Formulierung des Stoßprozesses ausgegangen werden. Dieses Ziel verlangt:

1. eine völlig quantenmechanische Anfangsformulierung für das ganze System,
2. einen einheitlichen und konzeptuell klaren Übergang zur Semiklassik.

Um den Anforderungen (1)-(2) zu genügen, bietet sich eine Methode an, die in engstem Zusammenhang mit dem Feynman-Propagator bzw. - Einflußfunktional (Fe. 63, 65) steht. Diese Methode besteht aus zwei Schritten:

1. Zuerst konstruiert man den quantenmechanischen Propagator des ganzen Systems,
2. dann ersetzt man den exakten Propagator durch seinen semiklassischen Ausdruck.

Folglich enthält diese Beschreibung die gewünschten Eigenschaften:

1. Die Anfangsbeschreibung (infolge des exakten quantenmechanischen Propagators) ist völlig quantenmechanisch.
2. Die Methode der stationären Phasen, angewandt auf den Propagator, ermöglicht einen technisch einheitlichen und prinzipiell klaren Übergang zur Semiklassik.

Aus einer qualitativen Analyse der umfangreichen experimentellen Daten läßt sich schließen, daß das resultierende physikalische Bild solcher Stoßprozesse einen dissipativen Charakter hat. Außerdem muß man die experimentellen Observablen meistens durch makroskopische Größen angeben. Folglich dienen zur Beschreibung der Stoßprozesse phänomenologische Modelle, die auf folgender Aufspaltung der relevanten Freiheitsgrade des physikalischen Systems beruhen:

- a) Die kollektiven oder makroskopischen Freiheitsgrade der Bewegung,
- b) Die inneren oder mikroskopischen Freiheitsgrade des Systems.

Zunächst sei das zu untersuchende Quantensystem durch die verallgemeinerten Koordinaten Q , P und das mit diesem wechselwirkenden Quantenobjekt durch ξ , η charakterisiert.

Wir nehmen an, daß alle interessierenden Observablen zum System $\hat{H}_1(Q, P, t)$ gehören und am System $\hat{H}_2(\xi, \eta, t)$ keine Messung durchgeführt werden soll. Die Wechselwirkung zwischen den Systemen beschreibt der Term: $\hat{H}_{12}(Q, P; \xi, \eta, t)$.

Die Aufgabe besteht darin, den Erwartungswert einer beliebigen Observablen nur durch die Variable Q des Systems $\hat{H}_1(Q)$, und zwar mit Berücksichtigung des Einflusses des mitwirkenden Systems $\hat{H}_2(\xi)$ zu berechnen.

Beispielsweise bezeichnet Q im Fall der inelastischen Schwerionenreaktionen sämtliche Kollektivvariablen (die Koordinaten der Relativbewegung der Ionen). Folglich ist $\hat{H}_1(Q)$ der Hamilton-Operator des Kollektivuntersystems, während $\hat{H}_2(\xi)$ das Mikrosystem mit den inneren Freiheitsgraden ξ (innere Anregungen der Kerne) charakterisiert.

Für die quantenmechanischen Interferenzeffekte (in der Nähe der Energieschwelle) und für die dissipativen Prozesse (im tiefinelastischen Falle) des Systems ist die Rückkopplung zwischen den beiden Klassen von Freiheitsgraden verantwortlich.

Unser Interesse lag darin, eine einfachste, nicht triviale theoretische Behandlung von komplexen Reaktionen zu untersuchen, nämlich die sogenannte "inklusive" bzw. "exklusive" Zeitentwicklung des Makrosystems (Fe. 63, 65), (Pe. 69) und (Mö. 81).

Auf die Frage, wie man die inklusive (bzw. exklusive) Übergangswahrscheinlichkeit für das Makrosystem: 1.) definieren und 2.) berechnen kann, gab die Antwort zuerst Feynman selbst:

Die Definition der inklusiven Übergangswahrscheinlichkeit (Fe. 63, 65).

Die Wahrscheinlichkeit, daß das Makrosystem sich innerhalb der Zeit T aus seinem angegebenen Anfangszustand in einen vorgeschriebenen Endzustand entwickelt, während das Mikrosystem aus einem bekannten (aber nicht notwendigerweise kohärenten) Anfangszustand in irgendeinen - für das weitere völlig belanglosen - Endzustand übergeht, bezeichnet man als die inklusive Übergangswahrscheinlichkeit für das Makrosystem.

Im Fall, daß in der obigen Definition auch der Endzustand des Mikrosystems vorgeschrieben ist, spricht man über die exklusive Übergangswahrscheinlichkeit des Systems.

Wie sie miteinander zusammenhängen, diskutieren wir im Abschnitt 4 unter dem Punkt 4.4.3 .

Die Berechnung der Wahrscheinlichkeit erfolgt semiklassisch, d. h.: die Behandlung des Mikrosystems durch die Schrödinger-Gleichung ist quantenmechanisch, während das Makrosystem durch klassische Bewegungsgleichungen

beschrieben wird. Wenn diese selbstkonsistent gelöst werden, enthalten die klassischen Bewegungsgleichungen alle nötigen Informationen über Interferenzphänomene, die bei Stoßprozessen auftreten. Der mikroskopische Hintergrund spielt nur die Rolle eines Hilfsfelds ("auxiliary field") (Mü. 62) und (Tom. 82).

Von dem Begriff der inklusiven Übergangswahrscheinlichkeit führt ein gerader Weg zur mittleren (klassischen) Trajektorie und mittleren Feld-Approximation (Wi. 74) und (Ne. 82).

Wie man diese mittlere Trajektorie und die inklusive Wahrscheinlichkeit durch exklusive Trajektorien und Wahrscheinlichkeiten konstruieren kann, wird im Abschnitt 4.3 betrachtet.

Man kann weitere nützliche Informationen über das Mikrosystem im Endzustand durch die Verteilungsfunktion der Observablen (Erwartungswerte und Schwankungen) erhalten.

Die semiklassische Näherung ergibt sich durch die Methode der stationären Phasen, angewendet auf den entsprechenden Feynman-Propagator.

Den Propagator und seine Eigenschaften behandeln wir ausführlich im Abschnitt 2.

Die sich ergebenden klassischen Bewegungsgleichungen für die exklusive (bzw. inklusive) Trajektorie betrachten wir im Abschnitt 4. Die durch die so erhaltene Trajektorie berechnete exklusive (bzw. inklusive) Übergangswahrscheinlichkeit wird im gleichen Abschnitt studiert.

Im Abschnitt 5 findet man die explizite Behandlung eines einfachen konkreten Modells.

Die dazugehörigen numerischen Ergebnisse werden im Abschnitt 7 diskutiert.

Mit offenen Fragen, analytischen Ergebnissen und einen Überblick befaßt sich der Abschnitt 6.

In dem Anhang findet man eine Zusammenfassung über die Methode der stationären Phasen.

2. Einführung des quantenmechanischen Propagators

Zunächst werden wir den quantenmechanischen Feynman-Propagator (Fe. 48) herleiten und seine wichtigsten Eigenschaften studieren. Mit Hilfe dieses Propagators kann man eine exakte Begründung für die zahlreichen semiklassischen Verfahren angeben (Be. 72) und (Schu. 81). Um den Propagator einzuführen, bedienen wir uns des wohlbekannten Zeitentwicklungsoperators (Tob. 56), (Pe. 66) und (Be. 72).

Nehmen wir ein allgemeines System mit N verallgemeinerten Koordinaten q^i ($i = 1, 2, \dots, N$) und kanonischen konjugierten Impulse p^i an. Die Bewegung des klassischen Systems wird durch die Hamiltonsche-Funktion $H = H(\vec{p}, \vec{q}, t)$ bestimmt werden, wobei $\vec{p}$ und $\vec{q}$ N -dimensionale Vektoren sind. In der klassischen Mechanik entwickelt sich das System aus der Konfiguration $\vec{q}'$ zum Zeitpunkt t' in die Konfiguration $\vec{q}''$ zu einem späteren Zeitpunkt t'' über eine wohldefinierte dazwischenliegende Konfigurationsmenge $\{\vec{q}_r(t) | t' \leq t \leq t''\}$. Diese Menge besteht aus den klassischen Bahnen $\vec{q}_r(t)$, die die Lösungen der kanonischen Hamilton-Gleichungen zwischen den Punkten $(\vec{q}', t') \equiv Q'$ und $(\vec{q}'', t'') \equiv Q''$ des Konfigurationsraumes sind. Diese lauten folgendermaßen:

$$\dot{\vec{q}}_r(t) = \partial_{\vec{p}} H, \quad \dot{\vec{p}}_r(t) = -\partial_{\vec{q}} H$$

mit den Randbedingungen:

$$\vec{q}_r(t') = \vec{q}' \quad \text{und} \quad \vec{q}_r(t'') = \vec{q}'',$$

wobei $r = 1, 2, \dots$ die Anzahl der (klassischen) Lösungen bezeichnet.

Die entsprechende quantenmechanische Entwicklung umfaßt die Menge aller denkbaren Pfade zwischen den

Punkten Q' und Q'' , also nicht nur die den klassischen Fällen entsprechenden Pfade. Um das zu beweisen, gehen wir von

$$\hat{H} \equiv H(\hat{p}, \hat{q}, t)$$

aus.

(Hier bezeichnet $\wedge$ einen Operator. Ferner schreiben wir $\hat{q}^+$ und $\hat{p}^+$, wenn sie zeitunabhängig sind.)

Der Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t'', t')$ ist durch die Formel

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \hat{U}(t'', t) &= \hat{H}(\hat{q}, \hat{p}, t) \hat{U}(t'', t) \\ \hat{U}(t, t) &= 1 \end{aligned} \quad (2.1)$$

definiert. $\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$, wenn $\hat{H} = \hat{H}^+$ gilt. Die Transformation $\hat{U}(t'', t')$ entwickelt die Zustände vom Zeitpunkt t' in den Zeitpunkt t'' . Insbesondere, wenn die Konfiguration $\vec{q}'$ zur Zeit t' bekannt ist und wir sie mit dem abstrakten Zustand $|\vec{q}'\rangle$ darstellen, dann ist die Wahrscheinlichkeit, die Konfiguration zum Zeitpunkt t'' in der infinitesimalen Umgebung der Zustände $|\vec{q}''\rangle$ und $|\vec{q}'' + d\vec{q}''\rangle$ zu finden:

$$P(Q''|Q') \equiv P(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') \equiv |\langle \vec{q}'' | \hat{U}(t'', t') | \vec{q}' \rangle|^2 d\vec{q}'' \equiv |K(Q''|Q')|^2 d\vec{q}''. \quad (2.2)$$

Hier ist durch die letzte Identität die Bezeichnung $K(Q''|Q')$ als "zeitabhängige Greenfunktion" oder "Propagator" für das Matricelement

$$\langle \vec{q}'' | \hat{U}(t'', t') | \vec{q}' \rangle \equiv K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') \equiv K(Q''|Q') \quad (2.3)$$

eingeführt worden.

Wir wünschen nun, den Propagator $K(Q''|Q')$ in Pfadintegral Darstellung zu berechnen. Diese Formulierung

hängt von der Kompositionseigenschaft des Operators $\hat{U}$ ab, es gilt nämlich für beliebige Zeit

$$\hat{U}(t', t) \equiv \hat{U}(t'', t) \hat{U}(t, t').$$

Diese Relation folgt aus der Gleichung (2.4). Wir beschränken uns auf Zeitpunkte zwischen t' und t'' .

Durch nochmaliges Anwenden der obigen Relation für eine Folge von zwischenliegenden Zeiten t_j ($j = 1, 2, \dots, n-1$; $t' = t_0$, $t_1, \dots, t_{n-1}$, $t_n = t''$; wobei das Zeitintervall $[t'; t'']$ in n Intervalle aufgeteilt wurde) können wir den Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}$ von t' zu t'' als eine Verkettung unitärer Transformationen ausdrücken, deren Argumente in immer kürzeren Zeitintervallen zu definieren sind:

$$\hat{U}(t'', t') = \prod_{j=0}^{n-1} \hat{U}(t_{j+1}, t_j).$$

Unsere bisherigen Überlegungen sind noch darstellungsfrei.

2.1. Darstellungsarten des Propagators

Um eine Pfaddarstellung für den Propagator zu erreichen, muß man eine konkrete Repräsentation wählen. Nehmen wir die Ortsdarstellung. Sodann geben wir weitere Relationen im Zusammenhang mit der q - und p -Darstellung an. Seien die beiden orthonormierten und vollständigen Eigenvektorsysteme durch die Relationen definiert:

$$\langle \vec{q}_v | \vec{q}_{v'} \rangle = \delta(\vec{q}_v - \vec{q}_{v'}), \int |\vec{q}_v\rangle d\vec{q}_v \langle \vec{q}_v| = \hat{1}, \quad \vec{q}^\dagger | \vec{q} \rangle = \langle \vec{q} | \vec{q} \rangle \quad (2.4a)$$

$$\langle \vec{p}_v | \vec{p}_{v'} \rangle = \delta(\vec{p}_v - \vec{p}_{v'}), \int |\vec{p}_v\rangle d\vec{p}_v \langle \vec{p}_v| = \hat{1}, \quad \vec{p}^\dagger | \vec{p} \rangle = \langle \vec{p} | \vec{p} \rangle$$

und ist der Zusammenhang zwischen den Basisvektorsystemen

$$\langle \vec{q} | \vec{p} \rangle^* = \langle \vec{p} | \vec{q} \rangle = h^{-\frac{N}{2}} e^{-\frac{i}{h} \vec{p} \vec{q}}, \quad (2.4b)$$

wobei

$$d\vec{q}_j \equiv dq^1(t_j) dq^2(t_j) \dots dq^N(t_j), \quad j = 1, 2, \dots, N-1$$

das N-dimensionale Koordinatenvolumenelement zu jedem Zeitpunkt zwischen t_1 und t_{n-1} bezeichnet.

Mit dem Grenzübergang $n \rightarrow \infty$ ergibt sich ein kontinuierlicher Übergang zwischen t' und t'' , dies führt zur Gleichung:

$$\begin{aligned} K(Q''|Q') &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int d\vec{q}_1 \dots \int d\vec{q}_{n-1} \prod_{j=0}^{n-1} K(j+1|j) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int d\vec{q}_1 \dots \int d\vec{q}_{n-1} \prod_{j=1}^{n-1} \langle \vec{q}_{j+1} | \hat{U}(t_{j+1}, t_j) | \vec{q}_j \rangle. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Der Integrand dieses unendlichdimensionalen Integrals hängt von den Koordinatenfolgen $\vec{q}_j = \vec{q}_j(t)$ ($j = 0, 1, \dots, n-1$) ab, die einen möglichen Pfad zwischen den Punkten $(\vec{q}', t')$ und $(\vec{q}'', t'')$ beschreiben. Deshalb liefert diese Gleichung für den Propagator einen Ausdruck in Form eines Integrals über alle denkbaren Pfade zwischen den gegebenen Endpunkten.

* * *

Bemerkung: Der spezielle Pfad des entsprechenden klassischen Systems hat hier noch keine Bedeutung.

* * *

* * *

Um den Ausdruck (2.5) zu berechnen, brauchen wir eine explizite Formulierung für $\langle \vec{q}'' | \hat{U}(t' + \varepsilon, t') | \vec{q}' \rangle$ wenn $\varepsilon \rightarrow 0$.

2.2. Der exakte quantenmechanische Fall

Man kann die Gleichung (2.1) für kleine ε leicht lösen, da man nämlich mit Hilfe des Lösungsansatzes, der die wesentliche Eigenschaft eines unitären Operators $\hat{U}$ enthält:

$$\hat{U}(t'+\varepsilon, t') = e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon H(\hat{p}, \hat{q}, t')} \quad (2.6)$$

Folglich ergibt sich

$$\langle \hat{q}'' | \hat{U}(t'+\varepsilon, t') | \hat{q}' \rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \langle \hat{q}'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon H(\hat{p}, \hat{q}, t')} | \hat{q}' \rangle. \quad (2.7)$$

Beiträge zu höheren Potenzen von ε gehen gegen Null, wenn wir die Formel (2.7) in jedem Faktor der Gleichung (2.5) einsetzen und die Zahl der Faktoren gegen Unendlich gehen lassen.

Beschränken wir uns jetzt auf kartesische Koordinaten q^i und Hamiltonoperatoren mit quadratischer Impulsabhängigkeit $(\hat{p}^i)^2$ sowie impulsunabhängigem Potential:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{(\hat{p}^i)^2}{2m_i} + V(\hat{q}, t). \quad (2.8)$$

Der Ursprung des Feynman-Pfadintegrals steht in Verbindung mit der mathematischen Identität

$$e^{\hat{A}} \equiv \left(e^{\frac{\hat{A}}{n}} \right)^n.$$

Die Weyl-Trotter-Produktsformel lautet nämlich:

$$\begin{aligned} \left(e^{-\tau \frac{\hat{T} + \hat{V}}{n}} \right)^n &= \left(e^{-\tau \frac{\hat{T}}{n}} e^{-\tau \frac{\hat{V}}{n}} + \frac{1}{2} [\hat{T}, \hat{V}] O\left(\frac{\tau^2}{n^2}\right) \right)^n \\ &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} \left(e^{-\tau \frac{\hat{T}}{n}} e^{-\tau \frac{\hat{V}}{n}} \right)^n. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Folglich kann man für die Gleichung (2.7) durch die

Wahl von (2.8) und die Identität (2.9) schreiben

$$\langle \vec{q}'' | \hat{U}(t+\varepsilon, t) | \vec{q}' \rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \langle \vec{q}'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \sum_{l=1}^N \frac{(\hat{p}_l^+)^2}{2m_l}} e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\vec{q}', t)} | \vec{q}' \rangle. \quad (2.10)$$

Da der multiplikative Operator $V(\vec{q}, t)$ im Koordinatenraum diagonal ist, darf man schreiben:

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\vec{q}', t)} | \vec{q}' \rangle = | \vec{q}' \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\vec{q}', t)}.$$

Folglich gilt:

$$\langle \vec{q}'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \sum_{l=1}^N \frac{(\hat{p}_l^+)^2}{2m_l}} e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\vec{q}', t)} | \vec{q}' \rangle = \langle \vec{q}'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \sum_{l=1}^N \frac{(\hat{p}_l^+)^2}{2m_l}} | \vec{q}' \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\vec{q}', t)} \quad (2.11)$$

Zunächst brauchen wir das Matrixelement des kinetischen Operators in Ortsdarstellung. Dazu fügen wir den Einheitsoperator des Impulsraums (2.4) in den zweiten Faktor der Gleichung (2.11) ein:

$$\begin{aligned} \langle \vec{q}'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \sum_{l=1}^N \frac{(\hat{p}_l^+)^2}{2m_l}} | \vec{q}' \rangle &= \int d\vec{p} \langle \vec{q}'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \sum_{l=1}^N \frac{(\hat{p}_l^+)^2}{2m_l}} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{q}' \rangle \\ &= \int d\vec{p} e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \sum_{l=1}^N \frac{(p_l^+)^2}{2m_l}} \langle \vec{q}'' | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{q}' \rangle = h^{-N} \int d\vec{p} e^{\sum_{l=1}^N \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{(p_l^+)^2}{2m_l} \varepsilon + \frac{i}{\hbar} p_l^+ (q''^l - q'^l) \right]} \\ &= h^{-N} \prod_{l=1}^N \int_{-\infty}^{+\infty} d p_l^+ e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{(p_l^+)^2}{2m_l} \varepsilon + \frac{i}{\hbar} p_l^+ (q''^l - q'^l)} d p_l^+. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Jeder Faktor im Produkt (2.12) ist ein Gaussintegral. Die allgemeine Formel für dieses Gaussintegral lautet:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-uz^2 + Vz} = \left(\frac{\pi}{u} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{V^2}{4u}}. \quad (2.13)$$

Mit Hilfe dieses Integrals bekommt man für (2.12)

$$\langle \vec{q}'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \sum_{l=1}^N \frac{(\hat{p}_l)^2}{2m_l}} | \vec{q}' \rangle = (i\hbar\varepsilon)^{-\frac{N}{2}} \left(\frac{N}{\hbar} \sqrt{m_l} \right) e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon \sum_{l=1}^N \frac{m_l}{2} \left(\vec{q}'' - \vec{q}' \right)^2} \quad (2.14)$$

Als Resultat für Gleichung (2.10) ergibt sich durch die Identitäten (2.11) und (2.14):

$$\langle \vec{q}'' | \hat{U}(t+\varepsilon, t) | \vec{q}' \rangle = (i\hbar\varepsilon)^{-\frac{N}{2}} \left(\frac{N}{\hbar} \sqrt{m_l} \right) e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon \left(\sum_{l=1}^N \frac{m_l}{2} (\vec{q}'' - \vec{q}')^2 - V(\vec{q}', t) \right)} \quad (2.15)$$

mit der Bedingung

$$|\vec{q}'' - \vec{q}'| > 0 \left(\sqrt{\frac{\varepsilon \hbar}{m_l}} \right) \quad (2.16)$$

für $l = 1, 2, \dots, N$. Diese Ungleichung ist die Heisenbergsche Unschärferelation, denn sie läßt sich schreiben

$$\frac{\hbar \Delta q}{\varepsilon} \Delta q = \Delta p \Delta q \gg \hbar.$$

Der Ausdruck (2.15) ist eine schnell oszillierende Funktion der Endpunkte $\vec{q}'$ und $\vec{q}''$, wenn die Bedingung (2.16) gilt. Gewöhnlich ist die Relation (2.16) erfüllt. Im Fall eines geschwindigkeitsabhängigen Potentials müssen wir in Formel (2.15) für das Argument des Potentials $(\vec{q}' + \vec{q}'')/2$ statt $\vec{q}'$ einsetzen.

Eine wichtige Konsequenz der Darstellung des Propagators (2.15) ergibt sich unmittelbar.

Man kann die Phasen und die Amplituden des Resultates (2.15) vermöge der Größen formulieren, die sich aus den zwischen den Punkten $\vec{q}'$ und $\vec{q}''$ verlaufenden klassischen Pfaden ergeben. Unter Beachtung der Tatsache, daß der Pfad für kleine Zeit ε eine Gerade ist, folgt für die Phasen in der Größenordnung ε :

$$\begin{aligned} \varepsilon \left(\sum_{t=1}^N \frac{m_t}{2} \frac{(q_t' - q_{t-1}')^2}{\varepsilon^2} - V(\vec{q}', t') \right) &= \varepsilon L(\vec{q}', \dot{\vec{q}}', t') \\ &= \int_{t'}^{t''} L(\vec{q}(t), \dot{\vec{q}}(t), t) dt \equiv W(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') \equiv W_{q'' q'} \end{aligned} \quad (2.17)$$

mit $t'' = t' + \varepsilon$. Dabei bezeichnet L bzw. W die klassische Lagrange- bzw. Wirkungsfunktion.

Die Amplitude ergibt sich durch die Wirkungsfunktion

$$\varepsilon^{-\frac{N}{2}} \prod_{t=1}^N (m_t)^{\frac{1}{2}} = \left((-1)^N \det_{t,p} \left(\frac{\partial^2 W(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t')}{\partial q_t' \partial q_p'} \right) \right)^{\frac{1}{2}} \equiv \left((-1)^N \mathcal{D}_{q'' q'} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.18)$$

Der gesuchte infinitesimale Propagator (2.15) hat durch (2.17) und (2.18) die folgende Gestalt:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \langle \vec{q}'' | \hat{U}(t' + \varepsilon, t') | \vec{q}' \rangle = \left((i \hbar^{-1})^N \mathcal{D}_{q'' q'} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} W_{q'' q'}}. \quad (2.19)$$

Dies ist die allgemeine Formel, welche die richtige Gestalt in der Größenordnung ε für beliebiges koordinaten- und geschwindigkeitsabhängiges Potential ist (siehe (More. 51) und (Witt. 57)). Wie Choquard (Cho. 55) bewiesen hat, stammt ein Beitrag zu dem infinitesimalen Propagator nur von der Gerade zwischen $(\vec{q}', t')$ ($\vec{q}'', t' + \varepsilon$), wenn gleichzeitig mehrere mögliche klassische Pfade zwischen den Punkten Q' und Q'' existieren.

Der Übergang von der infinitesimalen Form (2.19) des Propagators zu endlichen Zeiten wird durch die Pfadintegraldarstellung (2.5) vermittelt. Das Ergebnis ist:

$$K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') = \lim_{n \rightarrow \infty} (i \hbar \varepsilon)^{-\frac{N}{2}} \int \dots \int \prod_{j=1}^{n-1} \left((-i \hbar \varepsilon)^{-N} \mathcal{D}_{j+1, j} \right)^{\frac{1}{2}} d\vec{q}_j e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^{n-1} W_{j+1, j}}, \quad (2.10)$$

oder

$$K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') = \int_{\vec{q}', t'}^{\vec{q}'', t''} d[\vec{q}(t)] e^{i \int_{t'}^{t''} L(\vec{q}(t), \dot{\vec{q}}(t), t) dt} \quad (2.21)$$

In diesem symbolisch formulierten Integral ist über alle Pfade $\{\vec{q}(t)\}$ zwischen den Punkten Q' und Q'' zu integrieren. Der Ausdruck (2.20) oder (2.21) ist immer noch exakt und erhält bisher keine Näherung.

2.2.1. Über die wesentlichen Eigenschaften des Propagators

1. Soweit als die Lagrangefunktion quadratisch ist, gilt das Superpositionsprinzip der quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsamplituden:

$$K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') = \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{q} K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}, t) K(\vec{q}, t | \vec{q}', t') .$$

2. Sie ist in Übereinstimmung mit der Heisenbergschen Unschärferrelation (siehe: Relation (1.16)), weil die Form (2.20) oder (2.21) feste Randwerte für die Koordinaten $\vec{q}''$ und $\vec{q}'$ angibt, aber keine Anfangswerte für Ort und Impuls wie $\vec{q}', \vec{p}'$ vorschreibt.
3. Der Propagator (2.3) - und seine Pfadintegraldarstellung (2.20) bzw. (2.21) - ist völlig quantenmechanisch, es genügt der Schrödinger-Gleichung:

$$i\hbar \partial_{t''} K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') = \hat{H}(\vec{q}'', t'') K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') \quad t'' > t' ,$$

und sein adjungierten K^+ der adjungierten Gleichung:

$$-i\hbar \partial_{t'} K^+(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') = K^+(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') \hat{H}^+(\vec{q}', t') ,$$

d. h.: K ist Lösung der adjungierten Schrödinger-Gleichung nach $(\vec{q}', t')$:

$$-i\hbar \partial_t K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') = K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') \hat{H}^+(\vec{q}', t').$$

Es gibt noch einige weitere Eigenschaften für den Propagator. Dies sind unter anderem die Fälle:

$$(4) \quad K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') = \delta(\vec{q}'' - \vec{q}'), \quad (2.22)$$

$$(5) \quad K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') = \sum_n |\phi_n(\vec{q}')|^2 e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t'' - t')},$$

$$(6) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} K^*(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') d\vec{q}'' = \delta(\vec{q}' - \vec{q}'),$$

dabei drückt die letzte Form die Wahrscheinlichkeitserhaltung aus. Die Relationen (4) und (5) sind die besonderen Fälle der Propagatordefinition in q -Darstellung:

$$[i\hbar \partial_t - \hat{H}(\vec{q}'', t'')] K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') = i\hbar \delta(\vec{q}'' - \vec{q}') \delta(t'' - t').$$

Die oben genannten Eigenschaften lassen sich durch ein vollständiges $\sum_n |\phi_n(t)\rangle \langle \phi_n(t)| = \hat{1}$ und orthonormiertes $\langle \phi_n(t) | \phi_m(t) \rangle = \delta_{nm}$ Zustandssystem der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \partial_t |\phi_n(t)\rangle = \hat{H} |\phi_n(t)\rangle$$

mit der Anfangsbedingung: $|\phi_n(t')\rangle = |n\rangle$ bzw. $\sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{1}$ und $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$ beweisen. Die alternative Formulierung lautet durch den Zeitentwicklungsoperator

$$(i\hbar \partial_t - \hat{H}) \hat{U}(t, t') = \hat{0} \quad \text{und} \quad \hat{U}(t', t') = \hat{1}.$$

Damit gilt:

$$|\phi_n(t)\rangle \equiv \hat{U}(t, t') |\phi_n(t')\rangle \equiv \hat{U}(t, t') |n\rangle.$$

Für einen explizit zeitunabhängigen $\hat{H}$ ergibt sich die Lösung

$$\hat{U}(t' + t, t') \equiv \hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} t \hat{H}}. \quad (2.23)$$

Durch Spektraldarstellung erhält man für $\hat{U}$

$$\hat{U}(t''+t, t') = \sum_n \hat{U}(t) | \phi_n(t') \rangle \langle \phi_n(t') | = \sum_n | \phi_n(t) \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \langle \phi_n(t') | \quad (2.24)$$

damit ist der Propagator definitionsgemäß

$$K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') \equiv \langle \vec{q}'' | \hat{U}(t'', t') | \vec{q}' \rangle = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} (t''-t') E_n} \phi_n(\vec{q}'', t'') \phi_n^*(\vec{q}', t') \quad (2.25)$$

dabei sind die Abkürzungen so

$$\phi_n(\vec{q}, t) \equiv \langle \vec{q} | \phi_n(t) \rangle$$

und

$$\langle \phi_n(t) | \phi_m(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{q} \phi_n^*(\vec{q}, t) \phi_m(\vec{q}, t)$$

zu verstehen. Folglich läßt sich schreiben:

$$\begin{aligned} \phi(\vec{q}'', t'') &= \langle \vec{q}'' | \phi(t'') \rangle \\ &= \langle \vec{q}'' | \hat{U}(t'', t') | \phi(t') \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{q}' \langle \vec{q}'' | \hat{U}(t'', t') | \vec{q}' \rangle \langle \vec{q}' | \phi(t') \rangle \\ &\equiv \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{q}' K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') \phi(\vec{q}', t') . \end{aligned}$$

Der Propagator (2.1) und seine Pfadintegraldarstellung spielen eine zentrale Rolle in der Quantenphysik. Es gibt zahlreiche alternative Formulierungen für den Propagator-K., u. a. in 2N-dimensionalen Phasenraum (Ga. 66), (Da. 63) und (Fe. 65). Der energieabhängige Green-Operator lautet (Ga. 66):

$$\hat{G}(E+i\varepsilon) \equiv (E+i\varepsilon - \hat{H})^{-1} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt \hat{U}(t) e^{\frac{i}{\hbar} (E+i\varepsilon)t} ,$$

wobei die Polenverteilung des Operators $\hat{G}(E+i\epsilon)$ dem Energiespektrum des Hamiltonoperators entspricht und die Residuen gerade die Quadrate der stationären Wellenfunktionen sind.

Die Energiespektralfunktion ergibt sich als

$$Y(t) \equiv S_P \hat{U}(t) \equiv \int K(\vec{q}, t+t | \vec{q}, t) d\vec{q} = \sum_n N_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (1.26b)$$

mit der positiven ganzen Zahl N_n

$$N_n = \int d\vec{q} |\varphi_n(\vec{q}, t)|^2.$$

N_n ist die Multiplizität der Entartung des Niveaus mit der Energie E_n .

Wenn man in (1.26b) $t = -i\hbar\beta$ ersetzt, ergibt sich die statistische Zustandssumme $Z(T)$:

$$Y(-i\hbar\beta) \equiv Z(T) = e^{-\frac{F(T)}{kT}}$$

dabei ist $\beta = (kT)^{-1}$, T die Temperatur, k die Boltzmann-Konstante und $F(T)$ die freie Energie.

Kehren wir jetzt zum Propagator $K(Q''/Q')$ zurück!

Wenn man den Propagator konkret berechnen will, erhebt sich die Frage: Für welche Fälle gibt es eine explizite Formulierung des quantenmechanischen Propagators mit oder ohne Pfadintegral-Darstellung?

Die Antwort lautet: Zu jedem Fall kann man eine explizite Formel für den Propagator erhalten, wenn der (sogar zeitabhängige oder nicht konservative) Hamiltonoperator in den Koordinaten und Impulsen bilinear ist. (Siehe u. a.: (Fe. 65), (Be. 72), (Schu. 81) und (Mar. 80).)

Wir merken an, daß dies gerade für den Fall von linearen Bewegungsgleichungen gilt!

Eine wichtige Ausnahme ist der Coulomb-Propagator (Schw. 64).

In den meisten anderen Fällen muß man, um den expliziten Propagator zu erhalten, irgendeine Approximation anwenden. Genau hier kann die Pfadintegral-Darstellung des Propagators eine wichtige Rolle spielen, weil es durch die Formeln (2.17) und (2.18) gelungen ist, ihn durch einfache klassische Größen auszudrücken.

2.2.2. Explizite Formeln

Aber bevor wir uns mit der semiklassischen Näherungsmethode befassen werden, wollen wir einige explizite Formeln für Propagator angeben.

Danach betrachten wir noch die Pfadintegral-Darstellung des Propagators im Phasenraum und den Zusammenhang zwischen beiden Repräsentationen.

In einigen wohlbekannten Beispielen läßt sich die Gestalt des Propagators explizit angeben. Dies sind unter anderem die Fälle:

- (1) Freie Teilchen im N-dimensionalen Raum,
- (2) Teilchen im eindimensionalen Potential,
- (3) Teilchen im kugelsymmetrischen Potential,
- (4) Harmonischer Oszillator

1-stes Beispiel (Fall (1)): $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu}$ bzw. $L = \frac{1}{2}\mu \dot{q}^2$; Die Impulsdarstellung des Propagators ist recht einfach:

$$\begin{aligned} K(\vec{p}'', t'' | \vec{p}', t') &= \langle \vec{p}'' | \hat{U}(t'', t') | \vec{p}' \rangle \\ &= \langle \vec{p}'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t''-t')} | \vec{p}' \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\vec{p}^2}{2\mu} (t''-t')} \delta(\vec{p}'' - \vec{p}'), \end{aligned} \quad (2.17)$$

wobei $\hat{p}^2 | \vec{p}' \rangle = p'^2 | \vec{p}' \rangle = p'^2 | \vec{p}' \rangle$ gilt, weil $\vec{p} = \text{Konstante}$ ist. In der Koordinatenrepräsentation ergibt sich das Resultat direkt aus dieser Form durch die Transforma-

tion

$$\langle \vec{q} | \vec{p} \rangle = h^{-\frac{N}{2}} e^{\frac{i}{h} \vec{p} \vec{q}},$$

so daß gilt:

$$K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') = \left(\frac{M}{i h (t'' - t')} \right)^{\frac{N}{2}} e^{\frac{i}{h} \mu \frac{(\vec{q}'' - \vec{q}')^2}{t'' - t'}}. \quad (2.29)$$

Im Exponent erscheint die klassische Wirkungsfunktion

$$W(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') \equiv \mu \frac{(\vec{q}'' - \vec{q}')^2}{t'' - t'},$$

die in p-Darstellung eine andere Form

$$\tilde{W}(\vec{p}'', t'' | \vec{p}', t') \equiv -\frac{\vec{p}''^2}{2\mu} (t'' - t')$$

hat.

In besonderen Grenzfällen ergeben sich noch die folgenden Repräsentationen für den Propagator:

(1) Im Grenzfall $t'' \rightarrow t'$ gilt:

$$K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') = \delta(\vec{q}'' - \vec{q}'),$$

wie es nach der allgemeinen Eigenschaft (2.22) sein muß. Der Grenzfall $(t'' - t') \rightarrow -i.0$ transformiert den Propagator in die Greenfunktion des Diffusionsproblems, somit ergibt sich eine gewöhnliche Repräsentation für die $\mathcal{J}$ -Funktion.

(2) Das Diagonalelement dieses Propagators K ist unabhängig von $\vec{q}$. Es gibt

$$K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') \equiv K(0, t'' | 0, t') = \left(\frac{M}{i h (t'' - t')} \right)^{\frac{N}{2}},$$

folglich kann man für (2.29) schreiben:

$$K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') = K(0, t'' | 0, t') e^{\frac{i}{\hbar} W(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t')}$$

2-tes Beispiel (Fall (4)); Harmonischer Oszillator:

$$\hat{H} = \frac{m}{2} \left[\frac{\hat{p}^2}{m^2} + \omega^2 \hat{q}^2 \right], \quad L = \frac{m\omega}{2} [\dot{q}^2 - \omega^2 q^2]$$

Der Propagator ist

$$K(q'', t'' | q', t') = \left(\frac{m\omega}{i\hbar \sin \omega(t'' - t')} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} W(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t')} \quad (2.19)$$

Dabei ergibt sich der Exponent wieder als klassische Wirkungsfunktion

$$W(q'', t'' | q', t') = \frac{m\omega}{2 \sin \omega t} [(q'^2 + q''^2) \cos \omega t - 2 q' q'']$$

Man erhält die Spektralfunktion $Y(t)$ durch das Diagonalelement des Propagators,

$$Y(t) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} K(q, t'' | q, t') dq$$

mit

$$K(q, t'' | q, t') = K(0, t' + t | 0, t') e^{-\frac{i}{\hbar} m \omega^2 q^2 t \tan(\frac{\omega t}{2})}$$

wobei

$$K(0, t' + t | 0, t') = \left(\frac{m\omega}{i\hbar \sin \omega t} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad t = t'' - t'$$

ist.

Damit läßt sich schreiben

$$Y(t) = [2i \sin(\frac{\omega t}{2})]^{-1} = e^{-\frac{i\omega t}{2}} [1 - e^{-i\omega t}]^{-1}$$

2.5. Pfadintegraldarstellung für den Propagator im Phasenraum

Um die Pfadintegral-Repräsentation des Propagators im Phasenraum zu betrachten, muß man analog verfahren, wie im Fall der Koordinatenraum-Repräsentation.

Nehmen wir also den (in Ortsraum dargestellten) Propagator $K(Q''|Q')$ gemäß Definition (2.3). Den Hamiltonoperator wollen wir in gleicher Form wie in Gleichung (2.8) angeben.

Per Definitionen kann man schreiben

$$K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') \equiv \langle \vec{q}'' | \hat{U}(t'', t') | \vec{q}' \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int d\vec{q}_1 \dots \int d\vec{q}_{N-1} \prod_{j=1}^N \langle \vec{q}_{j+1} | \hat{U}(t_{j+1}, t_j) | \vec{q}_j \rangle,$$

wobei $\hat{U}$ durch (2.4) definiert und durch die explizite Formel (2.6) gegeben ist. Um den infinitesimalen Propagator zu berechnen, muß man diesen so umwandeln:

$$\langle \vec{q}_{j+1} | \hat{U}(t_{j+1}, t_j) | \vec{q}_j \rangle = \int d\vec{p}_j \langle \vec{q}_{j+1} | \vec{p}_j \rangle \langle \vec{p}_j | \hat{U}(t_{j+1}, t_j) | \vec{q}_j \rangle$$

daraus folgt mit $t_{j+1} = t_j + \varepsilon$ ($N\varepsilon = t'' - t'$), $\vec{q}_j = \vec{q}(t_j)$, $\vec{p}_j = \vec{p}(t_j)$:

$$\begin{aligned} \langle \vec{p}_j | \hat{U}(t_j + \varepsilon, t_j) | \vec{q}_j \rangle &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \langle \vec{p}_j | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon H(\hat{q}_j, \hat{p}_j, t_j)} | \vec{q}_j \rangle \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \langle \vec{p}_j | e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \sum_{l=1}^N \frac{\hat{p}_l^2}{2m_l}} e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon V(\hat{q}_j, t_j)} | \vec{q}_j \rangle \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \left[\sum_{l=1}^N \frac{(\vec{p}_j^l)^2}{2m_l} + V(\vec{q}_j, t_j) \right]} \langle \vec{p}_j | \vec{q}_j \rangle. \end{aligned}$$

Damit erhält man für den infinitesimalen Propagator

$$\begin{aligned} \langle \vec{q}_{j+1} | \hat{U}(t_j + \varepsilon, t_j) | \vec{q}_j \rangle &= \int d\vec{p}_j \langle \vec{q}_{j+1} | \vec{p}_j \rangle \langle \vec{p}_j | \vec{q}_j \rangle e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon \left[\sum_{l=1}^N \frac{(\vec{p}_j^l)^2}{2m_l} + V(\vec{q}_j, t_j) \right]} \\ &= h^{-N} \int d\vec{p}_j e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon \left[\vec{p}_j \cdot (\vec{q}_{j+1} - \vec{q}_j) - \varepsilon H(\vec{q}_j, \vec{p}_j, t_j) \right]}. \end{aligned}$$

Für das endliche Zeitintervall $(t'' - t')$ folgt das Ergebnis unmittelbar, nämlich

$$\begin{aligned} K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') &= \langle \vec{q}'' | \hat{U}(t'', t') | \vec{q}' \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int \dots \int \prod_{j=1}^{n-1} d\vec{q}_j \langle \vec{q}_j | \hat{U}(t_j, t_{j-1}) | \vec{q}_{j-1} \rangle \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int \dots \int d\vec{q}_{n-1} \dots d\vec{q}_1 d\vec{p}_{n-1} \dots d\vec{p}_1 \langle \vec{q}'' | \vec{p}_{n-1} \rangle \langle \vec{p}_{n-1} | \hat{U}(t'', t_{n-1}) | \vec{q}_{n-1} \rangle \dots \langle \vec{p}_1 | \hat{U}(t_1, t') | \vec{q}' \rangle \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int \dots \int e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{n-1} [\vec{p}_j (\vec{q}_{j+1} - \vec{q}_j) - \epsilon H(\vec{p}_j, \vec{q}_j, t_j)]} \prod_{j=1}^{n-1} \frac{d\vec{p}_j}{\hbar} \prod_{j=1}^{n-1} \frac{d\vec{q}_j}{\hbar} \end{aligned}$$

mit $\vec{q}_0 = \vec{q}' = \vec{q}(t')$ und $\vec{q}_n = \vec{q}'' = \vec{q}(t'')$. Die Summe im Exponent kann man als klassische Wirkungsfunktion W entlang des Pfades im Phasenraum zwischen den Endpunkten ansehen:

$$W(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') \equiv \int_{t'}^{t''} [\vec{p} \dot{\vec{q}} - H(\vec{p}, \vec{q}, t)] dt.$$

Die Pfadintegralrepräsentation für den Propagator im Phasenraum ergibt sich

$$K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') \equiv \int d[\vec{q}] d[\vec{p}] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} [\vec{p} \dot{\vec{q}} - H(\vec{p}, \vec{q}, t)] dt} \quad (2.30)$$

Die Integration über die q -Koordinaten müssen wir über alle Pfade zwischen den Punkten $\vec{q}'$ und $\vec{q}''$ auf den N -dimensionalen Hyperebenen des $2N$ -dimensionalen Phasenraums berechnen, während der Integration über die p -Koordinaten keiner Beschränkung unterliegt. Aber die Berechnung des Integrals (2.30) verlangt für jedes endliche n eine p -Integration mehr als q -Integrationen vorliegen.

Unter Beachtung der konkreten Form des Hamiltonoperators (2.8) erhält man - durch die Berechnung des Integrals (2.30) über die p -Koordinaten mit Hilfe der Gauss-Integralform (2.13) die Formulierung des Propagators (2.10-21) wieder:

$$K(\vec{q}'' | \vec{q}') \equiv K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') = \int_{\vec{q}', t'}^{\vec{q}'', t''} d[\vec{q}(t)] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) dt} \quad (2.31)$$

mit

$$d[\vec{q}(t)] = (i\hbar\varepsilon)^{-\frac{N}{2}} \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^{n-1} (i\hbar\varepsilon)^{-\frac{N}{2}} d\vec{q}_i, \quad n \cdot \varepsilon = t'' - t'.$$

2.4 Die S-Matrix

(Bemerkung: Siehe u. a.: (Schu. 81), (Mi. 74) und (Mar. 80).)

(1) In der (klassischen oder quantenmechanischen) Streutheorie wählt man gewöhnlich die Impulsdarstellung für den Propagator. Mit den Grenzübergängen $t' \rightarrow -\infty$ und $t'' \rightarrow +\infty$ erhalten wir die S-Matrix als eine Art von Propagator. Mathematisch bedeutet diese Darstellung eine doppelte Fourier-Transformation, wenn der Propagator in Ortsdarstellung gegeben worden war:

$$\langle \vec{p}'' | \hat{S} | \vec{p}' \rangle \equiv \lim_{\substack{t' \rightarrow -\infty \\ t'' \rightarrow +\infty}} K(\vec{p}'', t'' | \vec{p}', t'),$$

mit

$$\begin{aligned} K(\vec{p}'', t'' | \vec{p}', t') &\equiv \langle \vec{p}'' | \hat{U}(t'', t') | \vec{p}' \rangle \\ &= \iint \langle \vec{p}'' | \vec{q}'' \rangle \langle \vec{q}'' | \hat{U}(t'', t') | \vec{q}' \rangle \langle \vec{q}' | \vec{p}' \rangle d\vec{q}' d\vec{q}'' \\ &= \hbar^{-N} \iint e^{\frac{i}{\hbar} [\vec{p}'' \vec{q}'' - \vec{p}' \vec{q}']} K(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') d\vec{q}' d\vec{q}''. \end{aligned}$$

- (2) Wenn der Operator $\hat{H}$ (2.2) explizit zeitabhängig ist, bedingt dies keine Änderung im obigen Formalismus und die Formeln gelten immer noch.
- (3) Die zunächst in der atomaren Streutheorie angewandte semiklassische Approximation des Propagators ist

eine fruchtbare Methode in der heutigen Schwerionen- und Kernphysik.

Der Propagator der Störungstheorie im Wechselwirkungsbild: Sei der zeitabhängige Hamiltonoperator $\hat{H}$ in folgender Form

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_s(t)$$

gegeben, wobei der Operator $\hat{H}_0$ ein bekanntes orthonormiertes und vollständiges System von Eigenzuständen $\{|\phi_u\rangle\}$ besitzt. Der Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t, t_0)$ ist durch die Gleichung:

$$i\hbar \partial_t \hat{U}(t, t_0) = (\hat{H}_0 + \hat{H}_s) \hat{U}(t, t_0)$$

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}$$

definiert.

Nehmen wir die Lösung $\hat{U}$ in Produktform

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}_0(t) \hat{U}_1(t, t_0) \quad , \quad \hat{U}_0(t) \equiv \hat{U}_0(t, t_0, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} t \hat{H}_0}$$

an, wobei die Gültigkeit der Gleichungen

$$i\hbar \partial_t \hat{U}_1(t, t_0) = \hat{H}_w(t) \hat{U}_1(t, t_0), \quad \hat{H}_w(t) = \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{H}_s(t) \hat{U}_0(t)$$

verlangt wird. Die (formale) Lösung lautet:

$$\hat{U}_1(t, t_0) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}_w(\tau) - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t ds \int_{t_0}^s d\tau \hat{H}_w(s) \hat{H}_w(\tau) + \dots$$

Durch die Operator-Identität

$$\hat{U}_1(t, t_0) \equiv \hat{U}_1(t, \tau) \hat{U}_1(\tau, t_0)$$

ergibt sich die Übergangsamplitude zwischen den Zustandsvektoren $|m\rangle$ und $|n\rangle$ für die Dauer $T=t''-t'$ ($t''=t, t'=t_0$)

$$U_{nm} \equiv \langle n | \hat{U}(t'', t') | m \rangle ,$$

mit

$$\hat{U}(t'', t') = \hat{U}(t'', \tau) \hat{U}^\dagger(t', \tau) = \hat{U}_0(t'') \hat{U}_1(t'', \tau) \hat{U}_1^\dagger(t', \tau) \hat{U}_0^\dagger(t') = \hat{U}_0(t'') \hat{U}_1(t'', t') \hat{U}_0^\dagger(t') ,$$

somit ist

$$\hat{S} = \lim_{\substack{t' \rightarrow -\infty \\ t'' \rightarrow +\infty}} \hat{U}_1(t'', t') .$$

Falls $|m\rangle$ und $|n\rangle$ stationäre Eigenzustände des Operators $\hat{H}_0$ sind, bekommt man das Matrixelement des Übergangs U_{nm} unmittelbar aus

$$U_{nm} = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n t'' - E_m t')} \langle n | \hat{S} | m \rangle .$$

Im Rahmen der Pfadintegral-Darstellung ist der semiklassische Ausdruck für Propagator $K(Q''/Q')$ sehr plausibel. Wenn man die Planck-Konstante $\hbar$ als eine kleine Größe ansehen kann, dann kann der (infinitesimale) Propagator in der Form

$$K \cong e^{\frac{i}{\hbar} W} = e^{\frac{i}{\hbar} [W_0 + i\hbar W_1 + (\hbar^2 W_2 + \dots)]}$$

angegeben werden. In diesem Ausdruck ist W_0 die klassische Wirkungskfunktion und die $\hbar$ -unabhängige Funktion W_1 erscheint hier als eine Größe, die nur durch die klassische Bewegung bestimmt ist.

Folglich ist die Wirkungskfunktion W , die in der klassischen Mechanik durch das Hamiltonprinzip $\delta W = 0$ die allgemeinen Bewegungsgleichungen erzeugt, dieselbe W , welche auch in der Quantenmechanik eine Hauptrolle spielt, nämlich die Wahrscheinlichkeitsamplituden der Entwicklung eines quantenmechanischen Systems in der Raum-Zeit bestimmt.

Zunächst betrachten wir den extrem klassischen Grenzfall: $\hbar \rightarrow 0$.

2.5 Der extrem klassische Grenzfall: $\hbar=0$

Mit der Ersetzung $\hbar=0$ verliert der Propagator $K(Q''/Q')$ seinen Sinn, man kann aber die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (der statistischen Physik) $P(Q''/Q')$ gemäß Definition (1.2) einführen.

Wir nehmen an, daß im quantenmechanischen Anfangszustand die Ortskoordinate $\vec{q}'$ exakt ($d\vec{q}' = \vec{0}$) definiert ist, folglich ergibt sich eine homogene Impulsverteilung im p -Raum. Die bedingte Wahrscheinlichkeit, die Impulse $\vec{p}^t$ im Bereich $(\vec{p}^t; \vec{p}^t + d\vec{p}^t)$ und zwar die Koordinaten in $\vec{q}^t = \vec{q}'^t$ zu finden, ist

$$P(\vec{p}^t \leq \vec{p}^t < \vec{p}^t + d\vec{p}^t | \vec{q}^t = \vec{q}'^t, t = 1, 2, \dots, N) \\ = |\langle \vec{p}^t | \vec{q}'^t \rangle|^2 d\vec{p}^t = |\hbar^{-N/2} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}^t \cdot \vec{q}'^t}|^2 d\vec{p}^t = \hbar^{-N} d\vec{p}^t. \quad (1.31)$$

Im klassischen Grenzfall ist die (Übergangs-)Wahrscheinlichkeit $P_{\text{kl}}(Q''/Q')$, daß das System sich aus dem Anfangszustand $(\vec{q}', t')$ mit homogener Impulsverteilung (1.31) entlang der möglichen klassischen Pfade zur Zeit t'' in den Bereich $(\vec{q}'' + d\vec{q}'', t'')$ entwickelt

$$P_{\text{kl}}(Q''/Q') d\vec{q}'' \equiv P_{\text{kl}}(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t') d\vec{q}'' = \sum_s \hbar^{-N} d\vec{p}_s^t.$$

Hier bezeichnet $d\vec{p}_s^t$ den Anfangsimpuls, der für das System nötig ist, um entlang des klassischen Pfad-"s" im Zeitintervall $(t'' - t')$ den Bereich $(\vec{q}'' + d\vec{q}''; t'')$ zu erreichen. Dabei durchläuft "s" die Anzahl aller möglichen klassischen Pfade zwischen den Punkten $(\vec{q}', t')$ und $(\vec{q}'', t'')$. Praktisch muß man, um jeden mitwirkenden Anfangsimpuls $\vec{p}_s^t$ zu finden, die gewünschten Impulse $\vec{p}_s^t$ entweder direkt aus der Newton-Gleichung bzw. aus den Hamilton-Gleichungen, oder indirekt durch die Relation

$$\vec{p}_s^t \equiv - \partial_{\vec{q}'} S^{(s)} \quad (1.33)$$

aus der Hamilton-Jacobi-Gleichung mit der Prinzipalfunktion:

$$S^{(s)} = S^{(s)}(\vec{q}'', t''/\vec{q}', t')$$
 für den s-ten Pfad bestimmen.

Die klassische Wahrscheinlichkeit ergibt sich aus:

$$\begin{aligned} P_{kl}(\vec{q}'', t''/\vec{q}', t') &= h^{-N} \sum_s \frac{d}{d\vec{q}''}(\vec{p}_s') = h^{-N} \sum_s \left| \frac{\partial}{\partial \vec{q}''}(\vec{p}_s'(\vec{q}'', t''/\vec{q}', t')) \right| \\ &= h^{-N} \sum_s |D_{\vec{q}''\vec{q}'}^{(s)}|, \end{aligned} \quad (2.34)$$

wobei die folgende Bezeichnung eingeführt worden ist:

$$D_{\vec{q}''\vec{q}'}^{(s)} \equiv (-1)^N \text{Det}_{sp} \left\{ - \frac{\partial^2}{\partial \vec{q}'' \partial \vec{q}'} (S^{(s)}(\vec{q}'', t''/\vec{q}', t')) \right\}.$$

Das ist gerade die Jacobi-Determinante der Variabeltransformation:

$$(\vec{q}'; \vec{p}') \longrightarrow (\vec{q}'; \vec{q}'')$$

mit

$$\vec{p}' = - \partial_{\vec{q}'} S.$$

(Siehe u. a.: (Be. 72), (Mi. 74), (Mar. 80) und (Schu. 81).)

* * *

Bemerkungen: (1) Der einzige Unterschied zwischen der völlig quantenmechanischen infinitesimalen Übergangswahrscheinlichkeit (siehe Formel (2.13))

$$\begin{aligned} P(\vec{q}'', t'+\epsilon/\vec{q}', t') &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left| \langle \vec{q}'' | \hat{U}(t'+\epsilon, t) | \vec{q}' \rangle \right|^2 \\ &= \left| (-i\hbar)^{-N} D_{\vec{q}''\vec{q}'}^{(s)} e^{\frac{i}{\hbar} S_{\vec{q}''\vec{q}'}} \right|^2 = h^{-N} |D_{\vec{q}''\vec{q}'}^{(s)}|, \end{aligned}$$

und der extrem klassisch-mechanischen Wahrscheinlichkeit

$$P_{kl}(\vec{q}'', t''/\vec{q}', t') = h^{-N} \sum_s |D_{\vec{q}''\vec{q}'}^{(s)}|$$

ist, daß für endliche Zeiten $t = t'' - t'$ weitere klassi-

sche Pfade hinzukommen können, die sich mit einem eigenen Beitrag zu $\mathcal{P}_u$ addieren. Wie Choquard (Cho. 55) bewiesen hat, ist die Lage mit dem infinitesimalen Propagator im quantenmechanischen Fall ganz anders; siehe die Bemerkung unter der Formel (2.13).

(2. a) In den Fällen, wo die Hamiltonfunktion $H(\vec{p}, \vec{q})$, oder die Lagrangefunktion $L(\vec{q}, \dot{\vec{q}})$, bzw. die Wirkungsfunktion $W(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t')$ in ihren Variablen bilinear ist, werden sich die Determinanten $\mathcal{D}_{q' q''}$ für beide Fälle (klassisch wie quantenmechanisch) unabhängig von $\vec{q}'$ und $\vec{q}''$ - und deshalb identisch - ergeben.

(2. b) Mit den Bedingungen (2. a) erhält man für diese Fälle eine eindeutige Funktion $S(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t')$ bzw. $\partial_{\vec{q}'} S(\vec{q}'', t'' | \vec{q}', t')$ der Variablen $\vec{q}', \vec{q}''$. Folglich hat die Gleichung (2.13)

$$\vec{p}' = - \partial_{\vec{q}'} S$$

nur eine einzige Lösung (d. h.: $s = 1$). Die Konsequenz für dieses Bewegungsproblem lautet also:

Die linearen Hamilton-Gleichungen - mit den obigen Randbedingungen - haben nur eine einzige Lösung als möglichen klassischen Pfad zwischen den Endpunkten $\vec{q}'$ und $\vec{q}''$ in dem Phasenraum.

3. Über die Problemformulierung des - durch ein klassisches oder quantenmechanisches System - gestörten Quantenobjektes

An dieser Stelle wollen wir kurz den Fall diskutieren,

daß ein Quantenobjekt durch ein klassisches oder Quantensystem gestört wird. Wir stellen eine allgemeine Methode vor, wie man solche Probleme formulieren kann. Diese Formulierung steht in engstem Zusammenhang mit dem Feynman-Propagator (Fe. 63, 65). Sei das zu untersuchende Quantensystem durch die verallgemeinerten Koordinaten Q, P und das mit diesem wechselwirkende Quantenobjekt durch ξ, η charakterisiert. Nehmen wir an, daß alle interessierenden Observablen zum System $\hat{H}_1(Q, P, t)$ gehören und am System $\hat{H}_2(\xi, \eta, t)$ keine Messung durchgeführt werden soll. Die Wechselwirkung zwischen den Systemen beschreibt der Term $\hat{H}_{1,2}(Q, P; \xi, \eta)$ (Eine solche Situation zeigt die schematische Abbildung 3.1).

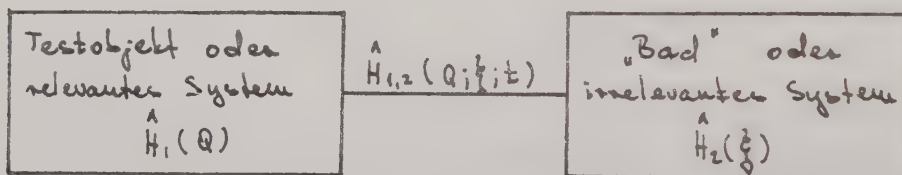


Fig. 3.1: Ein allgemeines Quantensystem $\hat{H}_1(Q)$ gekoppelt an das Quantenobjekt $\hat{H}_2(\xi)$ durch die Wechselwirkung $\hat{H}_{1,2}(Q, \xi, t)$. Es gilt

$$[\hat{H}_1(Q) + \hat{H}_2(\xi) + \hat{H}_{1,2}(Q, \xi, t)] \Psi(Q, \xi, t) = i\hbar \partial_t \Psi(Q, \xi, t),$$

wobei $\Psi(Q, \xi, t)$ die zu berechnende Lösung des Problems ist.

Die Aufgabe besteht darin, den Erwartungswert eines beliebigen Observablen nur durch die Variable Q des Systems $\hat{H}_1(Q)$, und zwar mit Berücksichtigung des Einflusses des mitwirkenden Systems $\hat{H}_2(\xi)$ zu berechnen. Wir merken an, daß die Operatoren $\hat{H}_1(Q)$ und $\hat{H}_2(\xi)$ - gewöhnlich - ein quantenmechanisches (Unter-) System darstellen, das heißt um eine solche Aufgabe zu behandeln, kann man zunächst mit einer vollständigen quantenmechanischen Formulierung des Problems beginnen.

Zwei Beispiele:

1. Ein Atom befinde sich im elektromagnetischen Feld, folglich kann dieses Atom strahlen. Nehmen wir an, daß wir die Strahlungsübergänge des Atoms beschreiben wollen, aber kein Interesse an dem Feld haben. In diesem Fall ist $\hat{H}_1(Q)$ das System des Atoms und Q bezeichnet sämtliche atomaren Koordinaten. Das äußere Feld ist charakterisiert durch $\hat{H}_2(\xi)$, wobei die Feldkoordinaten durch ξ beschrieben sind.
2. Nehmen wir den Fall der tiefinelastischen Schwerionenreaktionen. Dabei bezeichnet Q sämtliche Kollektivvariablen (hier z. B. die Koordinaten der Relativbewegung der Ionen). Folglich ist $\hat{H}_1(Q)$ der Hamiltonoperator des Kollektivuntersystems, während $\hat{H}_2(\xi)$ das Mikrosystem mit den inneren Freiheitsgraden ξ (innere Anregungen der Kerne) charakterisiert.

Sei die Wirkung des Systems $\hat{H}_1(Q)$ bzw. $\hat{H}_2(\xi)$ $S_1[Q(t)]$ bzw. $S_2[\xi(t)]$, ferner sei für die Wechselwirkung $\hat{H}_{1,2} = \hat{H}_{1,2}(Q(t), \xi(t), t)$ die Wirkung mit $S_{1,2}[Q(t); \xi(t)]$ bezeichnet. Dann können wir mit Hilfe der Wirkung des kombinierten Systems die (exklusive) Wahrscheinlichkeit* $P_{\text{excl}} = P(Q'', \xi'', t'' | Q', \xi', t')$ durch eine doppelte Pfad-Integral-Darstellung des Produktpropagators $K^+ K = P$ angeben. Der Propagator ist

$$K(Q'', \xi'', t'' | Q', \xi', t') = \int d[\xi] d[Q] e^{\frac{i}{\hbar} (S_1[Q(t)] + S_2[\xi(t)] + S_{1,2}[Q(t); \xi(t)])} \quad (3.1)$$

* (Siehe die Bemerkungen der Seite 32.)

und das Produktfunktional $J = P = \tilde{K}^+ K$ erhält die folgende Form:

$$J = \int d[Q] d[\tilde{Q}] e^{\frac{i}{\hbar} (S_1[Q] - S_1[\tilde{Q}])} * \int d[\xi] d[\tilde{\xi}] e^{\frac{i}{\hbar} (S_2[\xi] - S_2[\tilde{\xi}] + S_{1,2}[Q, \xi] - S_{1,2}[\tilde{Q}, \tilde{\xi}])} \quad (3.2)$$

Weil unsere Observable Q ist, interessiert die (explizite) ξ -Abhängigkeit nicht, folglich ergibt sich die Antwort

$$J = \iint d[Q(t)] d[\tilde{Q}(t)] e^{\frac{i}{\hbar} (S_1[Q(t)] - S_1[\tilde{Q}(t)])} F[Q(t); \tilde{Q}(t)], \quad (3.3)$$

dabei ist $F[Q; \tilde{Q}]$ das Einflußfunktional (Fe. 63; 65). In unserem Fall hat F die Form:

$$F = \iint d[\xi] d[\tilde{\xi}] e^{\frac{i}{\hbar} (S_2[\xi] - S_2[\tilde{\xi}] + S_{1,2}[Q, \xi] - S_{1,2}[\tilde{Q}, \tilde{\xi}])} \quad (3.4)$$

Bemerkungen über die exklusiven und inklusiven Übergangswahrscheinlichkeiten: (1) Man bezeichnet die Größe $P_{\text{excl}} = P(Q'', \xi'', t'' | Q', \xi', t')$ als exklusive Übergangswahrscheinlichkeit des Objekts $\hat{H}_1(Q, t)$. Das bedeutet, daß sich das zur Zeit t' im Anfangszustand Q' befindliche System $\hat{H}_1(Q, t)$ innerhalb der Zeit $T = t'' - t'$ in den Endzustand Q'' entwickelt, während das System $\hat{H}_2(\xi, t)$ aus dem gegebenen Anfangszustand ξ' in den vorgeschriebenen Endzustand ξ'' propagiert.

Dies entspricht dem Absolutbetrag des oben gegebenen Propagators. Diesen Fall zeigt die Abbildung 3.2

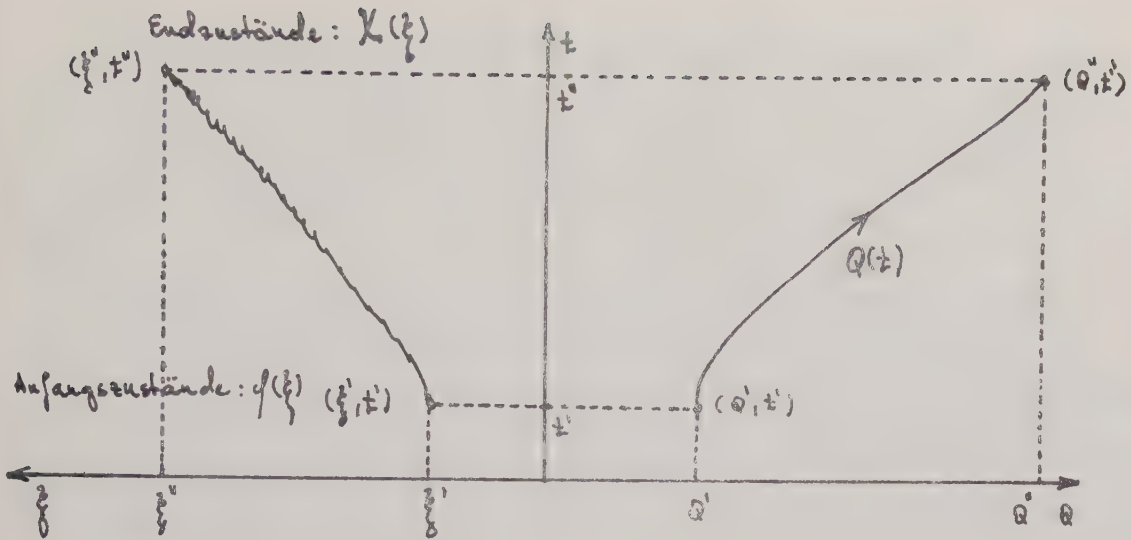


Abbildung 3.2; Die exklusive Übergangswahrscheinlichkeit

(2) Wenn man an dem System $\hat{H}_1(\xi, t)$ keine Messungen durchführen will, dann sind alle Endzustände ξ_v'' für $\hat{H}_1(\xi, t)$ möglich, folglich müssen wir die Wahrscheinlichkeit P_{excl} bzw. das Funktional $\mathcal{F}$ in (3.1) über die - durch ξ_v'' bestimmten - Endzustände integrieren. So ergibt sich die inklusive Übergangswahrscheinlichkeit, d.h. die Wahrscheinlichkeit $P(Q'', t''/Q', t')$ für das Objekt $\hat{H}_1(Q, t)$, daß das System $\hat{H}_1(Q, t)$ sich innerhalb der Zeit $T = t'' - t'$ aus seinem angegebenen Anfangszustand (t', Q') in einen vorgeschriebenen Endzustand (t'', Q'') entwickelt, während das System $\hat{H}_1(\xi, t)$ aus einem bekannten (aber nicht notwendigerweise kohärenten) Anfangszustand (t', ξ_0') in irgendeinen (für das weitere völlig belanglosen) Endzustand ξ_v'' (v ist dabei beliebig) übergeht; folgenderweise:

$$P_{\text{incl}}(Q'', t''/Q', t') = \sum_v P_{\text{excl}}(Q'', \xi_v'', t''/Q', \xi_0', t'). \quad (3.5)$$

Definitionsgemäß muß man in dem Integral (3.3) folgenden Ausdruck

$$\sum_v F_v[Q(t); \tilde{Q}(t)] \quad (3.6)$$

statt des Funktionals $F[Q(t); \tilde{Q}(t)]$ für die Fälle der

inklusiven Übergänge einsetzen. Dabei bedeutet die $\Sigma(\dots)$ (hier in Koordinatendarstellung), daß die Wechselwirkung $\hat{H}_{12}(Q, \xi, t)$ nach der Zeit t'' Null ist, deshalb müssen wir die Randwerte $\xi(t'') = \tilde{\xi}(t'') = \xi''$ nehmen und über alle ξ'' integrieren.

In einer kurzen Übersicht können wir konstatieren, daß man das Verhältnis eines (Test-)Systems $\hat{H}_1(Q)$ unter Beeinflussung durch ein (Bad-)Systems $\hat{H}_2(\xi)$ mit Hilfe einer doppelten Pfad-Integral Formulierung (3.3) diskutieren kann. Dabei ist $F[Q; \tilde{Q}]$ die Eigenschaft des (Bad-)Systems $\hat{H}_2(\xi)$ sein Einfluß auf das (Test-)System $\hat{H}_1(Q)$. Das Funktional $F[Q; \tilde{Q}]$ enthält im selbstkonsistenten Sinn sämtliche Eigenschaften des (Bad-)Systems $\hat{H}_2(\xi)$ die für $Q(t)$ erheblich sind. (D.h. das Funktional $F[Q; \tilde{Q}]$ ändert sich selbst als Folge der Änderung des (Bad-)Systems $\hat{H}_2(\xi)$ wegen dessen Wechselwirkung $\hat{H}_{12}(Q, \xi, t)$ mit dem (Test-)System $\hat{H}_1(Q)$.)

Wenn beide Systeme $\hat{H}_1(Q)$ und $\hat{H}_2(\xi)$ mikroskopisch sind, erhalten wir eine quantenstatistische Aufgabe. Die dynamische (zeitliche) Entwicklung des erheblichen (Test-, oder relevanten) Systems $\hat{H}_1(Q)$ ist durch das Funktional $\mathcal{J}$ bestimmt. (Hier ist die Rolle von $\mathcal{J}$ äquivalent zu der Master-Gleichung (Wi. 74). Das unerhebliche (Bad-, oder irrelevante) System $\hat{H}_2(\xi)$ ist durch das Funktional $F[Q; \tilde{Q}]$ für die Fluktuationen um den mittleren Wert der Observablen Q verantwortlich.) Dieser Einfluß des Systems $\hat{H}_2(\xi)$ auf das System $\hat{H}_1(Q)$ realisiert sich durch die Wechselwirkung $\hat{H}_{12}(Q, \xi, t)$ selbstkonsistenterweise (Fe. 63, 65).

In dem Fall, daß man den Charakter der Wechselwirkung des Systems $\hat{H}_1(Q)$ als klassisch annehmen kann, ist die durch das Funktional- $\mathcal{J}$ determinierte dynamische Gleichung eine Bewegungsgleichung vom Newton'schen Typ für die Observable Q .

Dabei ist der äußere Kraftterm gerade durch das Funktional $F[Q, \tilde{Q}]$ gegeben. Diese (sogar stochastische) Kraft ist der auf das klassische System wirkende "Einfluß" des Quantensystems $\hat{H}_2(\xi)$ wegen der Kopplung: $\hat{H}_{12}(Q, \xi, t)$ zwischen $\hat{H}_1(Q)$ und $\hat{H}_2(\xi)$. Der Einfluß durch $F[Q, \tilde{Q}]$ realisiert sich selbstkonsistenterweise.

Folglich ergibt die Technik des Einflußfunktionals die Möglichkeit, einen klaren Unterschied zwischen den reinen dynamischen und quantenmechanischen Charakteren der wechselwirkenden Quantensysteme zu erklären und die oben genannten Probleme semiklassisch zu betrachten.

Im Folgenden wollen wir unsere Untersuchung Aufgrund der Feynman-Einflußfunktionals-Methode durchführen.

3.1 Ein kleiner geschichtlicher Überblick: Fakten, Ergebnisse, Mängel

Als erster hat P. Pechukas eine solche Methode für atomare Stoßprozesse eingeführt (1969), mit der Absicht, die Rückwirkung $\hat{H}_{12}$ der inneren Übergänge stoßender Atome $\hat{H}_2$ auf die klassische Bahnbewegung $\hat{H}_1$ zu betrachten (Pe.69). Dabei ergab sich die gewünschte semiklassische Bewegungsgleichung durch die Feynman Pfad-Integral-Darstellung des Propagators (3.4).

In der Kernphysik haben diese Methode (mit entsprechender Modifizierung für die wesentlich höheren Energien) zuerst S. Levit, U. Smilansky und D. Pelte (Le.74) angewendet, um die Übergangswahrscheinlichkeiten für Vielfach-Coulombanregung zu berechnen. Dabei haben sie aber die Rückwirkung $\hat{H}_{12}$ des Quantensystems $\hat{H}_2(\xi)$ auf die eigene Trajektorie $Q(t)$ nicht beachtet.

Um die Streu- und Reaktionsquerschnitte für elastische und inelastische Reaktionen in der Schwerionenphysik zu betrachten, führten P. Pechukas und W. Miller eine weitere semiklassische Methode ein, ebenso J. Knoll

und R. Schaeffer (1973) (Kn. 73, 76), ferner R. A. Malfliet und T. Koeling (1973) (Ma. 75) und (Koel. 75). In ihrer Methode ergeben sich - wegen der optischen Potentiale - die Trajektorien komplex (jedenfalls in Umgebung der Wechselwirkungsregion), wobei auch sie die Rückwirkung $\hat{H}_{1v}$ auf die Trajektorie $Q(t)$ nicht beachteten.

Der erste Vorschlag, um die Einflußfunktional-Methode für die tiefinelastischen Streuungen in der Schwerionenphysik zu behandeln, stammt von D. M. Brink, J. Neto und H. A. Weidenmüller (1979) (Br. 79). Ihr Ziel war, aus dem Einflußfunktional Transport-(Reibungs- und Diffusions-)koeffizienten zu gewinnen und die Verteilung der Wechselwirkungsmatrixelemente zu erhalten. Folglich haben sie die semiklassische Beschreibung der Relativbewegung $\hat{H}_1(Q)$ (und zwar die Rückwirkung $\hat{H}_{1v}$ auf die eigene Trajektorie $Q(t)$) nicht in Betracht gezogen.

4. Semiklassische Behandlung der exklusiven bzw. inklusiven Übergänge, Bahnbewegungen und Übergangswahrscheinlichkeiten durch den Feynman-Pfadintegral Formalismus

Wir wollen hier ein semiklassisches Verfahren vorschlagen, um dissipative Prozesse zu betrachten. Es handelt sich um den Fall der Wechselwirkung eines relevanten klassischen Systems (z. B. Relativbewegung von zwei Schwerionen) mit einem irrelevanten quantenmechanischen Objekt (innere Anregung beider Fragmente).

Dies Verfahren ist charakterisierbar durch die folgenden drei Eigenschaften:

- A.1 Man kann aus unserer Formulierung des obigen Problems einen Ausdruck für die exklusive bzw. inklusive Übergangswahrscheinlichkeit der relevanten Freiheitsgrade des Systems erhalten, und nebenbei
- A.2 ist es möglich, die Verteilung der Observablen nach der Wechselwirkung zu berechnen, z. B. u. a.: die Energieverteilung des Endzustands.

Es ist ein semiklassischer Formalismus; d. h.:

- B.1 Die Freiheitsgrade des Makrosystems - als auch die dynamischen (relevanten) Variablen des ganzen Systems - genügen den klassischen Bewegungsgleichungen; daraus sieht man, daß diese Gleichungen dissipative Prozesse beschreiben.
 - B.2 Das (irrelevante) Mikrosystem wird völlig quantenmechanisch behandelt.
- C Unser Formalismus ist der semiklassische Grenzfall der Feynman-Einflußfunktional-Methode zur Theorie der

dissipativen Prozesse (Fe.63, 65).

Die Essenz der ganzen Formulierung liegt in der Wahl des Grundfunktional für das Variationsproblem.

Gewöhnlich taucht dieses Variationsproblem als die Methode der stationären Phasen auf, um den semiklassischen Grenzfall zu entwickeln. Die Rolle eines solchen Funktional kann der Propagator (als Übergangswahrscheinlichkeitsamplitude) selbst, oder das Einflußfunktional (als Übergangswahrscheinlichkeit) spielen.

Wie wir noch sehen werden, ist dies Einflußfunktional, das die Wechselwirkung $\hat{H}_{1,2}$ zwischen dem Makro- ($\hat{H}_1$) und dem Mikro- ($\hat{H}_2$) System beschreibt, die entscheidende Frage für jede weitere Diskussion.

Gewöhnlich muß man, um eine explizite Konstruktion des Einflußfunktional (bzw. Propagators) zu erhalten, irgendwelche Modelle bzw. Approximationen für das Mikrosystem $\hat{H}_2$ und für den Wechselwirkungsterm $\hat{H}_{1,2}$ einführen.

Zur Beachtung: Die obige Herleitungsmethode eines besonderen Einflußfunktional (Propagators) ist ein quantenmechanisches Schema.

Die semiklassische Grenzfallbildung wird eine weitere, und zwar wesentlich unterschiedliche Näherung für das Einflußfunktional (den Propagator) ergeben.

Es seien hier drei in der tiefinelastischen Streuung oft benutzte Arten dieser Approximationen angegeben (Fe. 63).

Diese sind (in Näherung des Grenzfalles verschwindender Temperatur):

- (1) Der harmonische Grenzfall mit linearer Kopplung. Das Mikrosystem ist charakterisiert durch eine kontinuierliche Oszillatorverteilung mit (in Oszillatorkoordinaten) linearer Kopplung zum Makrosystem. Das Einflußfunktional ist analytisch bekannt.

- (2) Diabatische Näherung (Grenzfall der schwachen Kopplung). Wegen der schwachen Kopplung zwischen den Mikrozuständen und den kollektiven Freiheitsgraden ist es ausreichend, die Anregungen durch den linearen Term der Störungsreihe zu beachten. Die schwache Kopplung macht es möglich, die Wechselwirkung zu linearisieren. Daraus folgt, daß man das diabatische Einflußfunktional in einer mit dem Oszillatorfunktional übereinstimmenden Form erhalten kann.
- (3) Die adiabatische Näherung (Grenzfall der niedrigen Relativgeschwindigkeit). Es ist hier ausreichend, die Behandlung im linearen Term der Relativgeschwindigkeit durchzuführen. (Da diese Näherung keine Beschränkung für die Kopplungsstärke enthält, gilt diese Approximation für eine schwache Kopplung ebenso wie für den adiabatischen oder starken Kopplungsfall). Diese Bedingungen des adiabatischen Grenzfalls werden erfüllt u. a. in der Überlappungsphase der Atomkerne bei der tiefinelastischen Schwerionenstreuung - z. B. in der Reaktion: $U - U$ (Se. 82,83), (Rh.83).

Als Folge der Linearisierung ergibt sich im Term der Relativgeschwindigkeit das adiabatische Einflußfunktional wieder in Form des Oszillatorfunktionals.

Man erkennt den wertvollen Vorteil der Methode des Einflußfunktionals gleich, die nämlich macht es möglich, verschiedene physikalische Prozesse durch den Formalismus einheitlich zu behandeln. Obwohl das Beispiel zum Gegenstand unserer Untersuchung ein einziger harmonischer Oszillator mit linearer Kopplung zum Makrosystem ist, haben deshalb unsere Diskussionen allgemeinere Gültigkeit als es zunächst den Anschein hat.

Als wir das explizite Einflußfunktional erhalten haben, ergab sich durch eine semiklassische Approximation der inklusive differentielle Streuquerschnitt (bzw. die inklusive Übergangswahrscheinlichkeit), also muß man um diesen Streuquerschnitt zu bekommen, für das Einflußfunktional den semiklassischen Grenzübergang durchführen. Nun die Einzelheiten: Zunächst geben wir die nötigsten Ergebnisse der Technik des Einflußfunktionals an.

4.1. Definition und allgemeine Eigenschaften des Einflußfunktionals

Das totale System sei im Phasenraum durch die Hamilton-Funktion $H = H(Q, P; \xi, \eta)$, im Koordinatenraum durch die Lagrange-Funktion $L = L(Q, \dot{Q}; \xi, \dot{\xi})$ beschrieben, dabei haben wir die griechischen Buchstaben $\xi, \dot{\xi}$ und η für die Mikrovariablen bzw. die groß geschriebenen Buchstaben $Q, \dot{Q}$ (gelegentlich $R, \dot{R}$) und P für die Makrovariablen (als verallgemeinerte Lage -, Geschwindigkeits- und Impulskoordinaten) eingeführt. Zur Vereinfachung nehmen wir an, daß $Q, \dot{Q}$ und P N -dimensionale (im besonderen Fall $N = 1$) und $\xi, \dot{\xi}, \eta$ n -dimensionale Vektoren (speziell $n = 1$) sind. Das totale System ist charakterisiert durch die Lagrange- L bzw. Hamilton- H Funktionen

$$L = L(\omega, \dot{\omega}; \xi, \dot{\xi}, t) = L_1(Q, \dot{Q}, t) + L_2(\xi, \dot{\xi}, t) + L_{1,2}(Q, \dot{Q}; \xi, \dot{\xi}), \quad (4.1)$$

$$H = H(\omega, P; \xi, \eta, t) = H_1(\omega, P, t) + H_2(\xi, \eta, t) + H_{1,2}(\omega, P; \xi, \eta, t), \quad (4.2)$$

wobei H durch

$$H(q, p, t) \equiv \sum \dot{q}_i \partial_{\dot{q}_i} L - L = \sum \dot{q}_i p_i - L \quad (4.3)$$

mit $L \equiv L(q, \dot{q}, t)$ und $p \equiv \partial_{\dot{q}} L$

definiert ist.

Die zeitlichen Endpunkte der Wechselwirkung werden mit t' und t'' bezeichnet, wobei deren Dauer $T \equiv t'' - t'$ ist. (Es wird gelegentlich $t' = 0$ und $t'' - t' = t'' = T$ gewählt).

Für das weitere betrachten wir ein orthonormiertes $\langle \phi_n(t) | \phi_m(t) \rangle = \delta_{nm}$ und vollständiges $\sum_n |\phi_n(t)\rangle \langle \phi_n(t)| = \hat{1}$ Lösungssystem der Schrödinger-Gleichung

$$i \hbar \partial_t |\phi_n(t)\rangle = \hat{H}[Q(t), P(t)] |\phi_n(t)\rangle \quad (4.4a)$$

mit der Anfangsbedingung

$$|\phi_n(t')\rangle = |n\rangle, \quad \langle n|m\rangle = \delta_{nm}, \quad \sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{1}. \quad (4.4b)$$

Eine alternative Formulierung lautet für den Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t, t')$ im Schrödinger-Bild

$$i \hbar \partial_t \hat{U}(t, t') = \hat{H}[Q(t), P(t)] \hat{U}(t, t'), \quad \hat{U}(t', t') = \hat{1}. \quad (4.5a)$$

Damit gilt

$$|\phi_n(t)\rangle = \hat{U}(t, t') |\phi_n(t')\rangle = \hat{U}(t, t') |n\rangle. \quad (4.5b)$$

Dabei ist $\hat{H} \equiv \hat{H}[Q(t), P(t)] \equiv \hat{H}^\dagger$ ein selbstadjungierter Operator im Hilbert-Raum des Mikrosystems und hängt von der Makrotrajektorie ab, deshalb ist $\hat{H}$ explizit zeitabhängig.

Der unitäre Schrödinger-Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t, t')$ hat die folgenden Grundeigenschaften:

$$\hat{U}^{-1}(t, t') = \hat{U}^\dagger(t, t') = \hat{U}(t', t) \quad \text{und} \quad \hat{U}(t'', t') = \hat{U}(t'', t) \hat{U}(t, t').$$

Es sollen noch die Wellenfunktionen in Koordinatendarstellung $\psi(\xi)$ und $\chi(\xi)$ folgenderweise eingeführt werden: Sei das Mikrosystem vor der Wechselwirkung (t') im Zustand $\psi(\xi)$ präpariert, und nach der Wechselwirkung (t'') befindet sich das Mikrosystem im Zustand $\chi(\xi)$.

Im Folgenden werden wir das Mikrosystem vor der Wechselwirkung im (kohärenten Zustand) Grundzustand annehmen. (Dieser Fall enthält physikalisch keine Beschränkung.)

Bemerkungen: (1) Im Weiteren werden wir den präparierten Zustand $\psi(\xi)$ als Grundzustand $\langle \xi | 0 \rangle = \phi_0(\xi)$ des Systems wählen. Den observierten Zustand $\chi(\xi)$ kann man als den n -ten angeregten Zustand des stationären Systems $\langle \xi | n \rangle = \phi_n(\xi)$ ansehen.

(2) Die Wahl $\phi_0(\xi) = \langle \xi | 0 \rangle$ entspricht dem Null-Temperatur-Grenzfall, sonst muß man mit dem Dichteoperator $\rho(\xi|\xi')$ statt den Produkten der Grundzustandswellenfunktionen $\phi_0(\xi) \phi_0^*(\xi')$ im Ausdruck der Übergangswahrscheinlichkeit operieren.

Hieraus erhält man die exklusive Wahrscheinlichkeit definitionsgemäß:

$$P_{\text{excl}} \equiv P(Q', n, t'' | Q', 0, t')$$

damit ist die inklusive Übergangswahrscheinlichkeit

$$P_{\text{incl}} = \sum_n P(Q', n, t'' | Q', 0, t').$$

Um diese Wahrscheinlichkeiten semiklassisch zu behandeln, nimmt man als natürliches Mittel die Feynman Pfad-Integral Darstellung.

Je nach Zweckmäßigkeit werden wir uns den Propagator in verschiedenen, d. h. Lagrange - oder Hamilton-Funktion Repräsentationen ansehen.

Wegen der breiteren Anwendbarkeit ist die Repräsentation des Propagators durch Hamiltonfunktion günstiger. Geschichtlich war aber zuerst die Lagrange-Formu-

lierung eingeführt und favorisiert worden.

Im Weiteren stellen wir Betrachtungen zum inklusiven Experiment vor. Zunächst untersuchen wir den Fall der Lagrange-Repräsentation des Feynman-Propagators.

4.2 Die Methode von P. Pechukas

Diese Methode ist angemessen um die Wechselwirkung eines klassischen Objekts mit einem quantenmechanischen System zu betrachten. Im Fall des Streuproblems, wie es bereits diskutiert worden ist, wählt man die Relativbewegung als Makrosystem $\hat{H}_1(Q, P)$ das Mikroobjekt besteht aus der inneren quantenmechanischen Struktur der Fragmente. Sei diese innere Bewegung der beiden Fragmente durch den Operator $\hat{H}_2(\xi, \eta)$ mit den stationären Lösungen: $\hat{H}_2(\xi, \eta)|u\rangle = \varepsilon_u |u\rangle$ ($u=0,1,\dots$) mit $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$ beschrieben.

Die Wechselwirkung zwischen $\hat{H}_1(Q, P)$ und $\hat{H}_2(\xi, \eta)$ ist durch den Operator (Potential) $\hat{H}_{12}(Q(t), \xi)$ beschrieben, und der Zeitentwicklungsoperator des Mikrosystems $\hat{U}$ ist durch die Gleichung

$$i\hbar \partial_t \hat{U} = (\hat{H}_1 + \hat{H}_{12}(Q(t); \xi)) \hat{U} \quad \text{mit} \quad \hat{U} = \hat{1} \quad \text{für} \quad t=t', \quad (4.6)$$

definiert. Wir wollen die Lösung dieser Gleichung für einen angegebenen (konkreten) Pfad $Q = Q(t)$ (mit Randbedingungen: $\xi(t') = \xi'$, $\xi(t'') = \xi''$, $Q(t') = Q'$, $Q(t'') = Q''$) gelegentlich mit $\hat{U}[Q(t); t, t']$, oder mit $\hat{U}_Q(t, t')$, oder - zur Vereinfachung - nur mit $\hat{U}(t, t')$ bezeichnen. Mit der klassischen Hamilton- H_1 (oder Lagrange $L_1(Q, \dot{Q})$) Funktion der Relativbewegung erhält man für das Wirkungsfunktional die Form

$$S_1[Q(t)] = \int_{t'}^{t''} L_1(Q(t), \dot{Q}(t), t) dt, \quad (4.7)$$

wobei die Randbedingungen: $Q(t') = Q'$ und $Q(t'') = Q''$ sind. Der Feynman-Propagator ist

$$K(Q'', \xi'', t'' | Q', \xi', t') = \iint d[Q(t)] d[\xi(t)] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} L(Q, \xi, t) dt} \quad (4.8)$$

mit $Q(t') = Q'$, $Q(t'') = Q''$, $\xi(t') = \xi'$ und $\xi(t'') = \xi''$. Für die exklusive Übergangsamplitude oder den reduzierten Propagator ergibt sich:

$$\begin{aligned} K_{n0}(Q'', t'' | Q', t') &\equiv \langle n | K(Q'', \xi'', t'' | Q', \xi', t') | 0 \rangle \\ &= \iint d\xi' d\xi'' \phi_n^*(\xi'') K(Q'', \xi'', t'' | Q', \xi', t') \phi_0(\xi') \\ &= \int d[Q(t)] U_{n0}[Q; t'', t'] e^{\frac{i}{\hbar} S_1[Q(t)]}, \end{aligned} \quad (4.9)$$

wobei

$$\begin{aligned} U_{n0}[Q; t'', t'] &= \langle n | \hat{U}[Q; t'', t'] | 0 \rangle \\ &= \int d[\xi] \iint_{-\infty}^{+\infty} d\xi'' d\xi' \phi_n^*(\xi'') e^{\frac{i}{\hbar} (S_1[\xi] + S_{1,2}[Q(t); \xi])} \phi_0(\xi') \end{aligned} \quad (4.10)$$

die trajektorienabhängige quantenmechanische Anregungsamplitude $0 \rightarrow n$ des Mikrosystems ist. (Dabei ist $\langle n | \hat{U} | 0 \rangle$ selbst eine Art Propagator).

Die Wellenfunktion $\phi_m(\xi)$ ist definiert mit Hilfe des Entwicklungsoperators $\hat{U}(t, t')$, nämlich

$$|\phi_m(t)\rangle \equiv \hat{U}(t, t') |m\rangle,$$

mit

$$\phi_m(\xi) \equiv \langle \xi | \phi_m \rangle.$$

* * *

Eine Bemerkung: Aus der Form (4.10) ergibt sich unmittelbar, daß die Funktionen $|\phi_n(t)\rangle$ und $|\phi_0(t)\rangle$ mit der Formel des Operators $\hat{U}$

Die Phase $\Phi[Q(t)]$ des Propagators $U_{n0}[Q(t); t, t']$ ist gegeben durch die Relation:

$$\Phi[Q(t)] \equiv \text{Im} \{ \ln(U_{n0}[Q(t); t, t']) \},$$

dabei gilt die Identität:

$$U_{n0}[Q(t); t, t'] \equiv |U_{n0}[Q(t); t, t']| e^{i \Phi[Q(t)]}.$$

Damit ergibt sich die Phase (oder das effektive Wirkungsfunktional S_{eff}) (4.11b) des Propagators (4.11a) in dieser Form:

$$S_{\text{eff}}[Q(t)] \equiv \int_{t'}^{t''} L_1(Q, \dot{Q}, t) dt + t' \text{Im} \ln U_{n0}[Q; t'', t']. \quad (4.12)$$

Die Größe $|U_{n0}|^2 = P_{n0}$ ergibt die Anregungswahrscheinlichkeit des inneren Systems infolge der Streuung. Folglich ist $P_{n0}[Q(t)]$ ein Funktional der Trajektorie $Q(t)$. Weil $\hat{U}(t, t')$ der Schrödinger-Gleichung genügt, ist eine Sache der Quantenmechanik, die Größe $|U_{n0}|^2$ zu bestimmen. (Man kann $|U_{n0}|^2$ als exklusive Übergangswahrscheinlichkeit lediglich des Mikrosystems ansehen.)

Definitionsgemäß erhält man die exklusive Übergangswahrscheinlichkeit des totalen Systems:

$$P_{\text{excl}}(Q'', n, t'' | Q', 0, t') \equiv |U_{n0}(Q'', t'' | Q', t')|^2 \quad (4.13)$$

hieraus folgt die inklusive Übergangswahrscheinlichkeit für das als klassisch angesehene System

$$\begin{aligned} P_{\text{incl.}}(Q'', t'' | Q', t') &\equiv \sum_n P_{\text{excl}}(Q'', n, t'' | Q', 0, t') \\ &\equiv \sum_n |U_{n0}(Q'', t'' | Q', t')|^2, \end{aligned} \quad (4.14)$$

wobei der Propagator durch die Formel (4.11a-b) gegeben ist.

Die Ergebnisse (4.11a-b), (4.13) und (4.14) sind exakt, um aber die konkreten Wahrscheinlichkeiten P_{incl} bzw. P_{excl} zu berechnen, muß man irgendwelche Approximationen für

den Propagator einführen.

Im Rahmen der Feynman-Theorie ist es möglich, solche Approximation einheitlich für den Propagator oder für die entsprechende Wahrscheinlichkeit zu finden, und zwar durch die Methode der stationären Phasen. (Dies ist der Gegenstand des übernächsten Abschnittes).

So weit die Methode von P. Pechukas (Pe. 69).

* * *

Schlußbemerkungen:

- (1) Bei Pechukas spielt der reduzierte (oder exklusive) Propagator (4.14a-b) die Rolle eines Grundfunktional der semiklassischen Approximation.
- (2) Seit 1969 ist seine Methode in zahlreichen Arbeiten unverändert angewendet bzw. zitiert worden.
- (3) Eine Verallgemeinerung dieser Methode findet man bei U. Smilansky und K. Möhring aus dem Jahre '81.
- (4) In unserer Untersuchung haben wir diese beiden Methoden vereinfacht (Kr. 84).
- (5) Eine weiterführende Formulierung der exklusiven Wahrscheinlichkeit entsteht durch ihre Doppel-Pfad-Integral Repräsentation:

$$\begin{aligned}
 P_{\text{excl}}(Q'', u, t'' | Q', 0, t') &= \tilde{U}_{u0}^+(Q'', t'' | Q', t') K_{u0}(Q'; t' | Q', t') \\
 &= \iint d[Q] d[\tilde{Q}] e^{\frac{i}{\hbar} (S_1[Q] - S_1[\tilde{Q}])} U_{u0}^+[\tilde{Q}; t'', t'] U_{u0}[Q; t', t'] \\
 &= \iint d[Q] d[\tilde{Q}] e^{\frac{i}{\hbar} \{ S_1[Q] - S_1[\tilde{Q}] + \hbar (\Phi[Q] - \Phi[\tilde{Q}]) \}} + U_{u0} \tilde{U}_{u0}^+, \quad (4.15)
 \end{aligned}$$

wobei $Q(t)$ und $\tilde{Q}(t)$ unterschiedliche Pfade zwischen

Q' und Q'' sind, die Randbedingungen lauten also: $Q(t') = \tilde{Q}(t') = Q'$, $Q(t'') = \tilde{Q}(t'') = Q''$; $\xi(t') = \tilde{\xi}(t') = \xi'$, $\xi(t'') = \tilde{\xi}(t'') = \xi''$, und der Operator $\hat{U} = \hat{U}[\tilde{Q}(t); t, t']$ genügt der Schrödingergleichung

$$i \hbar \partial_t \hat{U} = (\hat{H}_1(\tilde{\xi}) + \hat{H}_{1,2}(Q(t); \tilde{\xi})) \hat{U} \quad (4.16)$$

mit $\hat{U} = 1$ für $t = t'$.

4.3. Die Methode des Feynman-Einflußfunctionals

4.3.1. Formulierung durch die Lagrange-Funktion

Gemäß der Bemerkung- (5) des vorigen Abschnittes und durch die Relation (4.14) erhält man die inklusive Übergangswahrscheinlichkeit in Doppel-Pfad-Integral-Darstellung:

$$\begin{aligned} P_{incl}(Q'', t'' | Q', t') &= \sum_n P_{incl}(Q'', n, t'' | Q', 0, t') \\ &= \sum_n |U_{n0}(Q'', t'' | Q', t')|^2, \end{aligned}$$

dabei ist der reduzierte (exklusive) Propagator K_{n0} durch (4.9) definiert

$$U_{n0}(Q'', t'' | Q', t') = \langle n | U(Q'', \xi'', t'' | Q', \xi', t') | 0 \rangle.$$

An dieser Stelle wollen wir eine alternative Definition für $P_{incl} = P$ geben (Fe. 63, 65):

$$\begin{aligned} &P(Q'', t'' | Q', t') \\ &= \int d\xi'' \iint d\xi' d\tilde{\xi}' \phi_0^*(\xi'') \phi_0(\xi') \iint d\xi_Q d\tilde{\xi}_Q d\xi_{\tilde{Q}} d\tilde{\xi}_{\tilde{Q}} e^{\frac{i}{\hbar} (S[\xi_Q; \xi'] - S[\tilde{\xi}_Q; \tilde{\xi}'])} \end{aligned} \quad (4.17)$$

mit dem Wirkungsfunktional

$$S[Q; \xi] = \int_{t'}^{t''} L(Q, \dot{Q}; \xi, \dot{\xi}) dt = \int_{t'}^{t''} (L_1(Q, \dot{Q}) + L_2(\xi, \dot{\xi}) + L_{12}(Q, \xi, t)) dt$$

$$= S_1[Q] + S_2[\xi] + S_{12}[Q; \xi], \quad (4.18)$$

wobei die Lagrange-Funktion mit Formel (4.1) angegeben ist, und die Bedeutung der Funktionale S_1 , S_2 , S_{12} offenbar ist.

Die Randbedingungen zu den Formeln (4.17-18) lauten wiederum:

$$Q(t') = \tilde{Q}(t') = Q', \quad Q(t'') = \tilde{Q}(t'') = Q'';$$

$$\xi(t') = \xi', \quad \tilde{\xi}(t') = \tilde{\xi}', \quad \xi(t'') = \tilde{\xi}(t'') = \xi''.$$

Durch die Einführung des Einflußfunktionals $F[Q; \tilde{Q}]$ (Fe.63, 65) erhält man die Form

$$P(Q'', t'' | Q', t') = \iint d[Q] d[\tilde{Q}] e^{\frac{i}{\hbar} (S_1[Q] - S_1[\tilde{Q}])} F[Q; \tilde{Q}] \quad (4.19)$$

dabei ist das Einflußfunktional F durch die Relation

$$F[Q(t); \tilde{Q}(t)] =$$

$$\int d\xi' \iint d\xi' d\tilde{\xi}' \phi_0^*(\tilde{\xi}') \phi_0(\xi') \iint d[\xi] d[\tilde{\xi}] e^{\frac{i}{\hbar} (S_2[\xi] - S_2[\tilde{\xi}] + S_{12}[Q; \xi] - S_{12}[Q; \tilde{\xi}])} \quad (4.20)$$

definiert. Das kann man mit Hilfe des Systems (4.4a-b) auch so formulieren

$$F[Q(t); \tilde{Q}(t)] = \sum_n \langle 0 | \hat{U}^\dagger[\tilde{Q}; t'', t'] | n \rangle \langle n | \hat{U}[Q; t', t'] | 0 \rangle$$

$$\sum_n \langle 0 | U_Q(\xi'', t'' | \xi', t') | n \rangle \langle n | U_Q(\xi', t' | \xi'', t'') | 0 \rangle \quad (4.21a)$$

mit

$$U_{Q(t)}(z'', t'' | z', t') = \hat{U}[Q(t); t'', t'] \\ = \int d[\xi] e^{\frac{i}{\hbar} (S_2[\xi] + S_{1,2}[Q(t); \xi])} \quad (4.21b)$$

(s. die Methode von Pechukas).

Es gibt noch eine äquivalente Form des Einflußfunktional (4.21a), die man durch die Anwendung des Systems (4.5a-b) bekommt:

mit

$$F[Q; \tilde{Q}] = \sum_n \langle \tilde{\phi}_0(t'') | n \rangle \langle n | \phi_0(t') \rangle = \langle \tilde{\phi}_0(t'') | \phi_0(t') \rangle, \\ |\tilde{\phi}_0(t'')\rangle = \hat{U}[\tilde{Q}(t); t'', t'] | 0 \rangle \quad \text{bzw.} \quad |\phi_0(t')\rangle = \hat{U}[Q(t); t, t'] | 0 \rangle. \quad (4.22)$$

Daraus ergibt sich die Wahrscheinlichkeit

$$P(Q'', t'' | Q', t') = \iint d[Q] d[\tilde{Q}] e^{\frac{i}{\hbar} S_{\text{eff}}[Q; \tilde{Q}]} \quad (4.23a)$$

wobei

$$S_{\text{eff}}[Q; \tilde{Q}] = \int_{t'}^{t''} dt \left\{ L_1(Q, \dot{Q}, t) - L_1(\tilde{Q}, \dot{\tilde{Q}}, t) \right\} + \hbar \Phi[Q; \tilde{Q}] \quad (4.23b)$$

ist und das Einflußfunktional

$$F[Q; \tilde{Q}] = e^{\frac{i}{\hbar} \Phi[Q; \tilde{Q}]} = e^{i \{-i \ln \langle \tilde{\phi}_0(t'') | \phi_0(t') \rangle\}} \quad (4.23c)$$

bzw.

$$\Phi[Q; \tilde{Q}] = -i \ln \langle \tilde{\phi}_0(t'') | \phi_0(t') \rangle. \quad (4.23d)$$

4.3.2. Formulierung durch die Hamiltonfunktion

Wir beginnen wieder mit der Definition der inklusiven Wahrscheinlichkeit

$$P(Q'', t'' | Q', t') = \sum_n P(Q'', n, t'' | Q', 0, t')$$

durch den Propagator

$$K(Q'', \dot{Q}'' | Q', \dot{Q}') = \int d[Q, P] \int d[\xi, \eta] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} (P\dot{Q} + \eta\dot{\xi} - H) dt}$$

mit den Randbedingungen: $Q(t') = Q'$, $Q(t'') = Q''$, $\xi(t') = \xi'$, $\xi(t'') = \xi''$.

Mit Hilfe der Matrixelemente $\langle n | K | 0 \rangle$ erhält man

$$P(Q'', t'' | Q', t') = \iint d[Q, P] d[\tilde{Q}, \tilde{P}] e^{\frac{i}{\hbar} (P\tilde{Q} - \tilde{P}\tilde{Q})} F[Q, P; \tilde{Q}, \tilde{P}], \quad (4.24a)$$

dabei ist das Einflußfunktional

$$F[Q, P; \tilde{Q}, \tilde{P}] = \sum_n \langle 0 | K_{\tilde{Q}\tilde{P}}^+ | n \rangle \langle n | K_{QP} | 0 \rangle, \quad (4.24b)$$

und der Propagator

$$K_{QP} = \int d[\xi, \eta] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} \{ \xi\dot{\eta} - H(Q(t), P(t); \xi, \eta) \} dt}. \quad (4.24c)$$

Den Ausdruck (4.24b) kann man durch die Lösungssysteme (4.4a-b) und (4.5a-b) umformulieren

$$F[Q, P; \tilde{Q}, \tilde{P}] = \langle \tilde{\Phi}_0(t'') | \Phi_0(t') \rangle \quad (4.24d)$$

(mit $|\Phi_0\rangle = \hat{U}(Q, P; t'', t') | 0 \rangle$, etc; ...).

Hieraus folgt also:

$$P(Q'', t'' | Q', t') = \iint d[Q, P] d[\tilde{Q}, \tilde{P}] e^{\frac{i}{\hbar} S_{\text{eff}}[Q, P; \tilde{Q}, \tilde{P}]} \quad (4.25a)$$

dabei ist

$$S_{\text{eff}}[Q, P; \tilde{Q}, \tilde{P}] = \int_{t'}^{t''} (P\dot{\tilde{Q}} - \tilde{P}\dot{Q}) dt - i\hbar \ln \langle \Phi_0(t'') | \Phi_0(t') \rangle. \quad (4.25b)$$

4.3.3. Eigenschaften

Hier wollen wir die wichtigsten Eigenschaften des Einflußfunktionals (Fe. 63, 65) zitieren.

1. $F^*[Q(t); \tilde{Q}(t)] = F[\tilde{Q}(t); Q(t)]$, wobei (...) * die Komplexkonjugation bezeichnet. (4.26)

2. Wenn das Mikrosystem aus den Untersystemen (1) und (2) besteht, wobei keine Wechselwirkung zwischen (1) und (2) besteht und sie keine Korrelation im Anfangszustand haben, dann gilt eine weitere Relation zwischen den Einflußfunktionalen:

$$F_{(1)+(2)} = F_{(1)} \cdot F_{(2)} . \quad (4.17)$$

3. Wenn der gemischte Anfangszustand durch die Wahrscheinlichkeitsverteilung ρ_i der Zustände $|i\rangle$ gegeben ist, erhält man das Einflußfunktional

$$F = \sum_i \rho_i F_i . \quad (4.18)$$

Nun sind wir in der Lage zu fragen, wie man diese inklusiven Wahrscheinlichkeiten konkret berechnen kann!

Die Antwort lautet: durch die Approximation der Wahrscheinlichkeiten mit der Methode der stationären Phasen.

Diese Betrachtung ist semiklassisch. Zunächst wollen wir diese Frage diskutieren.

4.4. Semiklassische Betrachtung der inklusiven Übergangswahrscheinlichkeit

- Klassische Bewegungsgleichung der Observablen;
- Schrödinger-Gleichung der Bad-Variablen

Wir begeben uns an die Approximation der Pfad-Integral-Repräsentation des Propagators bzw. des Einflußfunktionals durch die Methode der stationären Phasen. Erstens: Nehmen wir an, der Hauptbeitrag des Integrals ergibt sich entlang solcher Kurven, für die die erste Variation des Integranden im Pfadintegral null ist.

Aus der Differentialgleichung der letzten Bedingung erhält man die klassischen Bewegungsgleichungen für die Makrovariablen (Observablen) - und zwar sind ihren Lösungskurven die klassischen Trajektorien - im Koordinaten bzw. im Phasen-Raum. Folglich ist diese Approximation eine semiklassische Näherung für das Makrosystem, während das Mikrosystem der Schrödinger-Gleichung genügt.

Zweitens: Wir wollen den Integranden der Pfad-Repräsentation durch seine quadratische Funktional-Taylor-Entwicklung entlang der oben genannten Trajektorien ersetzen. So erhält man den Beitrag der klassischen Trajektorien zu den inklusiven Übergangswahrscheinlichkeiten.

Zuerst betrachten wir die Bewegungsgleichungen.

4.4.1. Das Modell von Pechukas

Aus dem Phasenfunktional (4.12) ergibt sich durch die Forderung nach verschwindender erster Variation die klassische Bewegungsgleichung:

$$\begin{aligned} \mu \ddot{R}(t) &= -\text{Re} \frac{\langle \phi_u(t) | \frac{\partial}{\partial R} \hat{H} | \phi_o(t) \rangle}{\langle \phi_u(t) | \phi_o(t) \rangle} \\ &= -\text{Re} \frac{(\hat{U}[R; t', t] \frac{\partial}{\partial R} \hat{H} \hat{U}[R; t, t'])_{n0}}{U_{n0}[R; t', t']} \quad . \quad (4.23) \end{aligned}$$

Unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Notation ist dieses Ergebnis identisch mit dem Resultat von Pechukas.

Des Weiteren ist es exakter, diese Trajektorien $R(t)$ oder $Q(t)$ eher mit $R_n(t)$ oder $Q_n(t)$ bezeichnen,

weil sie zu exklusiven Übergängen gehören, folglich zustandsabhängig sind.

Als Konsequenz der Gleichung (4.19) kann man Erhaltungssätze für sämtliche Observablen (u. a.: Energie, Drehimpuls, etc., ...) entlang der Trajektorien $R_n(t)$ herleiten. Für die Energie lautet das Erhaltungsgesetz

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \dot{R}_n^2(t) + Re \frac{(\hat{U}[R_n(t); t'', t] \hat{H}(R_n(t)) \hat{U}[R_n(t); t, t'])_{n_0}}{U_{n_0}[R_n(t); t'', t]} \right) \equiv 0. \quad (4.30)$$

4.4.2. Unsere klassischen Bewegungsgleichungen

Das hier abgeleitete Ergebnis stammt aus einer Vereinfachung der Methode von Feynman und Vernon (Fe.63) bzw. Feynman (Fe.65) und Smilansky - Möhring (Mö. 81).

Der wesentliche Unterschied zwischen der obigen und der nun folgenden Betrachtung ist, daß wir dort für die Pfad-Integral-Repräsentation des Propagators eine Approximation eingeführt haben, während dieselbe Näherung hier für die Pfad-Integral-Darstellung der inklusiven Wahrscheinlichkeit angewandt wird.

Wir beginnen mit dem effektiven Wirkungsfunktional S_{eff} in Formel (4.15b).

Die Variation des Funktionals S_{eff} muß man nach den Variablen R und $\tilde{R}$ bilden, es folgt

$$\delta S_{\text{eff}} = \int_{t'}^{t''} dt (\dot{R} \delta P - \dot{P} \delta R + \dot{\tilde{P}} \delta \tilde{R} - \dot{\tilde{R}} \delta \tilde{P}) - i \frac{\langle \tilde{\Phi}_0(t'') | \delta \Phi_0(t'') \rangle + \langle \delta \tilde{\Phi}_0(t') | \Phi_0(t') \rangle}{\langle \tilde{\Phi}_0(t') | \Phi_0(t') \rangle}.$$

Wenn man die Funktionenvariation $|\delta \Phi_0(t'')\rangle$ durch die Schrödinger-Gleichung unter Beachtung der Anfangsbedingungen

$$|\phi_w(t')\rangle = |w\rangle \quad \text{und} \quad |\delta\phi_0(t')\rangle = 0,$$

berechnet, dann ergeben sich mit der Hilfsform

$$|\delta\phi_0(t'')\rangle = -\frac{i}{\hbar} \sum_l |\phi_l(t'')\rangle \int_{t'}^{t''} \langle \phi_l(t) | \frac{\partial \hat{H}}{\partial Q} \delta Q + \frac{\partial \hat{H}}{\partial P} \delta P | \phi_0(t) \rangle$$

(eine analoge Form gilt für $|\delta\tilde{\phi}_0(t'')\rangle$) aus der verschwindenden ersten Variation des Funktionals die kanonischen Gleichungen:

$$\langle \dot{R}(t) \rangle = \frac{\langle \tilde{\phi}_0(t) | \hat{U}_0(t, t') \partial_R \hat{H} | \phi_0(t) \rangle}{\langle \tilde{\phi}_0(t') | \phi_0(t') \rangle} \quad (4.31a)$$

$$- \langle \dot{P}(t) \rangle = \frac{\langle \tilde{\phi}_0(t) | \hat{U}_0(t, t') \partial_P \hat{H} | \phi_0(t) \rangle}{\langle \tilde{\phi}_0(t') | \phi_0(t') \rangle} \quad (4.31b)$$

und analoge Gleichungen für $\langle \tilde{R}(t) \rangle$ und $\langle \tilde{P}(t) \rangle$:

$$\langle \tilde{R}(t) \rangle = \frac{\langle \phi_0(t) | \partial_{\tilde{R}} \hat{H}^\dagger \hat{U}_0^\dagger(t, t') | \tilde{\phi}_0(t') \rangle}{\langle \phi_0(t') | \tilde{\phi}_0(t') \rangle} \quad (4.31c)$$

$$- \langle \tilde{P}(t) \rangle = \frac{\langle \phi_0(t) | \partial_{\tilde{P}} \hat{H}^\dagger \hat{U}_0^\dagger(t, t') | \tilde{\phi}_0(t') \rangle}{\langle \phi_0(t') | \tilde{\phi}_0(t') \rangle} \quad (4.31d)$$

Die beiden letzten Trajektorien sind die komplex konjugierten der Trajektorien $\langle R(t) \rangle$ und $\langle P(t) \rangle$.

Dabei genügen gleichzeitig die Funktionen $|\phi_0(t)\rangle$, $|\tilde{\phi}_0(t)\rangle$ bzw. die Operatoren $\hat{U}[R(t), P(t); t, t']$, $\hat{U}[\tilde{R}(t), \tilde{P}(t); t, t']$ der Schrödinger-Gleichung wie in (4.4) bzw. (4.5):

$$i\hbar \partial_t \hat{U}[R, P; t, t'] = \hat{H}[\langle R(t) \rangle, \langle P(t) \rangle; t, t'] \hat{U}[R, P; t, t']$$

$$\hat{U}[R, P; t, t'] = \hat{I} \quad ; \quad |\phi_w(t)\rangle = \hat{U}[R, P; t, t'] |w\rangle, \quad (4.32a)$$

und

$$i\hbar \partial_t \hat{U}[\tilde{Q}, \tilde{P}; t, t'] = \hat{H}[\langle \tilde{Q}(t) \rangle, \langle \tilde{P}(t) \rangle; \tilde{q}, \tilde{y}] \hat{U}[\tilde{Q}, \tilde{P}; t, t'] \quad (4.32b)$$

mit $\hat{U}[\tilde{Q}, \tilde{P}; t, t'] = \hat{1} \quad ; \quad |\tilde{\phi}_L(t)\rangle = \hat{U}[\tilde{Q}, \tilde{P}; t, t'] |L\rangle.$

Der Operator $\hat{U}_0(t, t'')$ ist also

$$\hat{U}_0[t, t'] = \hat{U}[t, t''] \hat{U}^+[t, t''] = \hat{U}[\tilde{Q}, \tilde{P}; t, t''] \hat{U}[\tilde{Q}, \tilde{P}; t, t''] \quad (4.33)$$

mit $\hat{U}_0^+[t, t''] = \hat{U}_0^+[t, t'].$

Die Randbedingungen für die Gleichungen (4.31-33) lauten:

$$\begin{aligned} Q(t') = \tilde{Q}(t') = Q' \quad , \quad Q(t'') = \tilde{Q}(t'') = Q'' \quad , \\ \tilde{q}(t') = \tilde{q}(t') = \tilde{q}' \quad , \quad \tilde{q}(t'') = \tilde{q}(t'') = \tilde{q}'' \quad . \end{aligned} \quad (4.34)$$

Man kann beweisen, daß die Relationen $\langle \tilde{Q}(t) \rangle = \langle Q^*(t) \rangle$ und $\langle \tilde{P}(t) \rangle = \langle P^*(t) \rangle$ gelten.

Wenn der Zusammenhang

$$\hat{H}^+[\langle Q(t) \rangle, \langle P(t) \rangle; \tilde{q}, \tilde{y}] = \hat{H}[\langle \tilde{Q}(t) \rangle, \langle \tilde{P}(t) \rangle; \tilde{q}, \tilde{y}]$$

gültig ist, dann erhält man das Gleichungssystem (4.31-33) in wesentlich einfacherer Form, nämlich

$$\begin{aligned} \langle \dot{Q}(t) \rangle &= \langle \phi_0(t) | \partial_P \hat{H} | \phi_0(t) \rangle \quad , \\ -\langle \dot{P}(t) \rangle &= \langle \phi_0(t) | \partial_Q \hat{H} | \phi_0(t) \rangle \quad , \end{aligned} \quad (4.35a)$$

und die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \partial_t \hat{U}(Q, P; t, t') = \hat{H}(Q, P; \tilde{q}, \tilde{y}) \hat{U}(Q, P; t, t') \quad , \quad \hat{U}(Q, P; t, t') = \hat{1} \quad ,$$

ferner $|\tilde{\phi}_L(t)\rangle \equiv |\phi_L(t)\rangle = \hat{U}(Q, P; t, t') |L\rangle \quad , \quad (4.35b)$

dabei sind noch die weiteren Relationen erfüllt:

$$\langle \tilde{Q}(t) \rangle \equiv \langle Q(t) \rangle \quad , \quad \langle \tilde{P}(t) \rangle \equiv \langle P(t) \rangle \quad \text{und} \quad \hat{U}_0(t, t'') = \hat{1} \quad .$$

Hier stellt das System (4.35) die Ehrenfest-Gleichungen (Me.76) dar.

Schlußbemerkungen:

- (1) In dem letzten genannten Fall ist das System (4.35) als Anfangswertproblem simultan lösbar.
- (2) Wenn $\hat{U}_0(t, t') \neq 1$ ist, dann kann man das System (4.35) nicht mehr simultan, sondern nur iterativ lösen.

4.4.3. Die inklusive Übergangswahrscheinlichkeit

Wir wollen wie gesagt den Propagator K

$$K = \int d[Q(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[Q(t)]}$$

entlang der Trajektorien $\bar{Q}(t)$ ($\bar{Q}(t) :=$ klassische Trajektorie)

$$\delta S[Q(t)] = 0 \longrightarrow \bar{Q} = \bar{Q}(t)$$

mit der Funktional-Reihenentwicklung

$$S[Q] = S[\bar{Q}] + \frac{1}{1!} \delta^2 S[Q] \Big|_{\bar{Q}} + \dots$$

approximieren, und zwar wird die Form

$$\begin{aligned} K &\approx e^{\frac{i}{\hbar} S[\bar{Q}]} \int e^{\frac{i}{\hbar} S_q[q(t)]} d[q(t)] \\ &= \tilde{K}_{\bar{Q}} e^{\frac{i}{\hbar} S[\bar{Q}]} \end{aligned}$$

genommen; dabei ist $\delta Q = q - \bar{Q}$; $S_{\bar{Q}}[q] = 1/2 \delta^2 S$ ferner

$$\tilde{K}_{\bar{Q}}(0, t' | 0, t') = \int_{0, t'}^{0, t'} e^{\frac{i}{\hbar} S_{\bar{Q}}[q(t)]} d[q(t)].$$

Im Fall von Pechukas erhält man (Pe.69), (Schu.81)

$$K_{u_0}(Q', t' | Q', t') = \int_{Q', t'}^{Q', t'} |K_{u_0}(Q(t); t', t')| e^{\frac{i}{\hbar} (S_1[Q] + \hbar \Phi[Q])} d[Q],$$

damit

$$K_{n0}^{sd}(Q'', t'' | Q', t') = U_{n0}[\bar{Q}(t); t'', t'] e^{\frac{i}{\hbar} S_1[\bar{Q}(t)]} \tilde{K}(0, t'' | 0, t'),$$

und

$$\tilde{K}(0, t'' | 0, t') = \int_{0, t'}^{Q, t''} e^{\frac{i}{\hbar} (S_1^{(0)}[q] + t \Phi_1[q] + \Phi_2[q])} d[q(t)]$$

($q = \bar{Q} - Q$),

wobei die Approximation für die Phase $\Phi[Q(t)]$

$$\Phi[Q(t)] \approx \int_{t'}^t dt U_{n0}[\bar{Q}(t); t'', t'] + \Phi_1[q] + \Phi_2[q]$$

ist. (Der Term $\Phi_1[q(t)]$ fällt wegen des Gliedes $S_1 = S_1[\bar{Q}(t) + q(t)]$ weg., Φ_1 linear, Φ_2 quadratisch in q .)

Im einfachsten Fall bekommt man die Relation (Schu. 81) und (Mö. 81):

$$\tilde{K}_{n,0}(0, t'' | 0, t') = \left(2\pi i \hbar \frac{\partial \bar{Q}_n(t'')}{\partial \bar{P}_n(t')} \bigg|_{\bar{Q}_n(t')} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

damit wird sich die exklusive Übergangswahrscheinlichkeit

$$P(Q'', t'' | Q', t') = \left| K_{n0}(Q'', t'' | Q', t') \right|^2 = \left| U_{n0}[\bar{Q}(t); t'', t'] K_{n0}(0, t'' | 0, t') \right|^2$$

$$= (2\pi\hbar)^{-1} \left| \left(\frac{\partial \bar{P}_n(t'')}{\partial \bar{Q}_n(t')} \right) \bigg|_{\bar{Q}_n(t')} \right| \left| \langle n | \Phi_0(t') \rangle \right|^2$$

ergeben. Dabei ist der erste Faktor die quantenmechanische Übergangswahrscheinlichkeit für $0 \rightarrow n$, und der Kehrwert des zweiten Faktors ergibt die klassische - statistische - Wahrscheinlichkeitsverteilung im Koordinatenraum. (Das ist gerade die van Vleck - Determinante (Vle.28))

Die inklusive Wahrscheinlichkeit ist definitionsgemäß

$$\begin{aligned}
 P(Q'', t'' | Q', t') &= \sum_n P(Q'', n, t'' | Q', 0, t') \\
 &= \sum_n |\langle n | \phi_0(t'') \rangle|^2 \left| \frac{\partial \bar{P}_n(t)}{\partial Q_n(t'')} \right| \bar{Q}_n(t') (2\pi\hbar)^{-1}.
 \end{aligned}
 \tag{4.36}$$

Die inklusive Wahrscheinlichkeit kann man auch noch durch das effektive Wirkungsfunktional

$$P_{Q,P} = \iint \mathcal{D}[\delta Q, \delta P] \mathcal{D}[\delta \tilde{Q}, \delta \tilde{P}] e^{\frac{i}{\hbar} \int \delta^2 S_{\text{eff}}}
 \tag{4.36'}$$

darstellen.

Es gibt zwei wesentlich unterschiedliche Fälle:

(1) Die beiden Trajektorien R, P und $\tilde{R}, \tilde{P}$ sind identisch.

(Dieser Fall tritt bei Pechukas auf.)

(2) Die Trajektorien R, P und $\tilde{R}, \tilde{P}$ sind unterschiedlich.

Die zweite Möglichkeit bedeutet nicht, daß mehrere mögliche Trajektorien $R_1(t), R_2(t), \dots$ zwischen den Endpunkten R' und R'' existieren. Den Unterschied zwischen diesen Fällen zeigen die Abbildungen 4.1a-b.

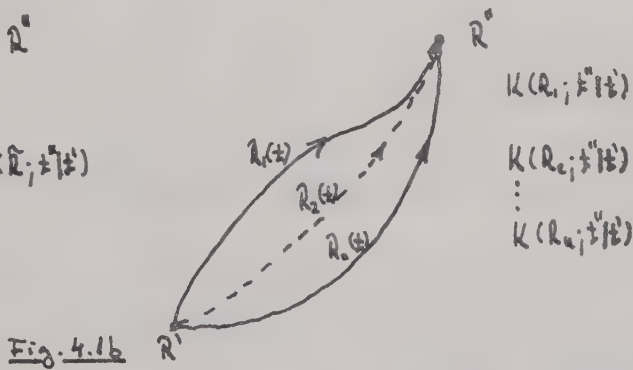
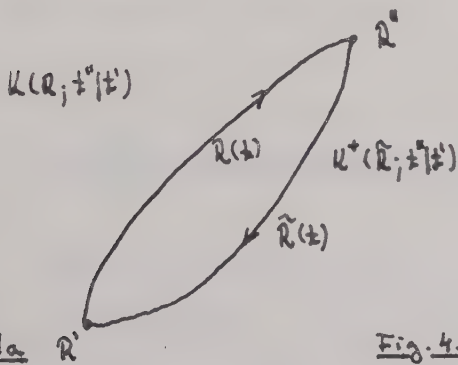


Fig. 4.1a

Fig. 4.1b

Fall 1: $R = \tilde{R}$ und $P = \tilde{P}$; Man bekommt für (4.36) nach einer (ziemlich mühsamen) Berechnung (Mö.81)

$$P_{Q,P} = (2\pi\hbar)^{-1} \left| \frac{\partial \langle P(t') \rangle}{\partial \langle Q(t'') \rangle} \right|.
 \tag{4.37}$$

Die inklusive Übergangswahrscheinlichkeit für das Makro-

system entsteht also als ein Ausdruck der klassischen Trajektorien, diese aber sind durch die (an das Bad-System gekoppelten) Ehrenfest-Gleichungen definiert.

Fall 2: Die inklusive Wahrscheinlichkeit ergibt sich als eine Summe von P_{QP} und $P_{\tilde{Q}\tilde{P}}$, es gilt nämlich

$$P = (P_{\tilde{Q}\tilde{P}} + P_{QP}) |u|^{-\frac{1}{2}} I(u, v) \quad (4.38a)$$

mit

$$I(u, v) = \pi^{-\frac{1}{2}} \int_0^{\infty} x^{-\frac{1}{2}} e^{-vx^2} \cos\left(ux - \frac{x^3}{12} - \frac{\pi}{4}\right) dx, \quad (4.38b)$$

dabei sind die Parameter u, v durch das gemischte effektive Wirkungsfunktional definiert:

$$u = \left[\frac{2}{\hbar} (S_{\text{eff}}(\tilde{q}, \tilde{p}; Q, P) - S_{\text{eff}}(Q, P; \tilde{q}, \tilde{p})) \right]^{\frac{2}{3}}, \quad (4.38c)$$

bzw.

$$v = -\frac{i}{\hbar} [S_{\text{eff}}(\tilde{q}, \tilde{p}; Q, P) + S_{\text{eff}}(Q, P; \tilde{q}, \tilde{p})]. \quad (4.38d)$$

(Diese Näherung stammt aus der sogenannten einheitlichen Approximation (Chi.78), (Mö.81), (Schu.81).)

Der Parameter v steht im Zusammenhang mit dem Operator $\hat{U}_0[t'', t']$ aus Gl.(4.33), und zwar $v=0$, wenn $\hat{U}_0[t'', t'] = \hat{1}$, und $v < 0$, wenn $\hat{U}_0[t'', t'] \neq \hat{1}$ gilt.

* * *

Schlußbemerkungen:

- (1) Für Fokuspunkte (s. Anhang) gilt $u = v = 0$, aber P in (4.38a) bleibt endlich wegen des Faktors $|u|^{-\frac{1}{2}}$.
- (2) Weil $\hat{U}_0[t'', t'] = \hat{1}$ bzw. $v = 0$ eine Art Interferenzbedingung ist, deshalb kann man Interferenzphänomene nur im Fall $v \approx 0$ und $|u| \approx 0$ erwarten.

Für die Hellseite des Fokus ($u > 0$ und $v \approx 0$) hat die

Funktion $I(u, v)$ ein starkes Oszillationsverhalten, folglich hat P eine Interferenzstruktur.

(3) Für die Schattenseite des Fokus ($u \ll 0$ und $v \approx 0$) - klassisch verbotener Übergang (!) - hat die Wahrscheinlichkeit (4.38a) kaum V -Abhängigkeit, deshalb ergibt sich kein Interferenzbeitrag. In diesem Fall übrigens sind die Trajektorien $Q, P, \tilde{Q}, \tilde{P}$ tatsächlich komplex!

(4) Wenn $|u| \rightarrow \infty$ ist, geht der Ausdruck (4.38a) in die Form (4.37) über.

* * *

* * *

4.4.4. Die Verteilung der Observablen im Endzustand

Wie bei der Methode von Pechukas, so kann man für die Observablen (u. A. Energie, Drehimpuls) Erhaltungssätze entlang der klassischen Trajektorien herleiten.

Aus dem Gleichungssystem (4.35) ergibt sich für die Energie

$$\frac{d}{dt} \langle \phi_0(t) | \hat{H}(Q(t), P(t); \xi, \gamma) | \phi_0(t) \rangle = 0, \quad (4.39a)$$

d. h. der Energieverlust des Makrosystems entlang des Pfades ist gerade die Anregungsenergie des Mikrosystems:

$$E(t'') - E(t') = - \left(\langle \varepsilon \rangle - \langle \varepsilon_0 \rangle \right) \quad (4.39b)$$

mit

$$\langle \varepsilon \rangle = \langle \phi_0(t'') | \hat{H}_2(\xi, \gamma) | \phi_0(t'') \rangle, \quad (4.39c)$$

und

$$\langle \varepsilon_0 \rangle = \langle 0 | \hat{H}_2(\xi, \gamma) | 0 \rangle, \quad (4.39d)$$

wobei wir die Kopplungslosigkeit zwischen den Untersystemen außerhalb der Wechselwirkungszeit $t < t'$ bzw. $t > t''$

annehmen müssen.

Die Energieverteilung und ihre Schwankung im Endzustand erhält man (u. A. nach der Formel (4.39c))

$$\langle \varepsilon^2 \rangle = \langle \phi_0(t'') | \hat{H}_0(\xi, \eta) | \phi_0(t') \rangle, \quad (4.40a)$$

womit definitionsgemäß folgt

$$\begin{aligned} \langle (\Delta \varepsilon)^2 \rangle &= \langle \varepsilon^2 \rangle - \langle \varepsilon \rangle^2 \\ &= \langle \phi_0(t'') | \hat{H}_0(\xi, \eta) | \phi_0(t') \rangle - \langle \phi_0(t'') | \hat{H}_0(\xi, \eta) | \phi_0(t') \rangle^2. \end{aligned} \quad (4.40b)$$

* * *

Bemerkungen:

- (1) Die Relationen (4.40a-b) : gelten, wenn die Breite $\langle (\Delta \varepsilon)^2 \rangle$ schmal ist.
- (2) Die Ergebnisse (4.40a-b) kann man als mittlere Feldapproximation ansehen.
- (3) Es gibt analoge Relationen für Spin-und Drehimpuls.

* * *

* * *

5. Die Berechnung eines Modells

Um die bisher vorgestellte Feynman-Theorie noch umfassender zu diskutieren, betrachten wir ein ausführliches Modell. Es handelt sich um ein harmonisches Mikrosystem mit linearer Kopplung zum Makrosystem.

* * *

Vorbemerkungen:

- (1) Die Behandlung basiert auf der Einflußfunktionsmethode.
- (2) Wegen der Eigenschaften (4.17) des Einflußfunktional, kann man sogar gleich eine kontinuierliche und zwar miteinander nicht gekoppelte Oszillatorverteilung als Mikrosystem ansehen. Als Folge dieser Eigenschaft müssen wir nur die Wechselwirkung zwischen einem einzigen Oszillator und dem Makrosystem berücksichtigen.
- (3) In Folge der Eigenschaft (4.28) des Einflußfunktional ist es jederzeit genügend, für den Anfangszustand den Grundzustand zu wählen.

* * *

* * *

5.1. Das Modell für Streuung eines Teilchens auf einem Vibratorkern

Die Abbildung 5.1 zeigt die Geometrie für Streuung eines einfallenden Teilchens durch ein Kraftzentrum.

$A; m$: Massenzahl bzw. Masse des Targetkerns;
 Θ : Streuwinkel;
 $R; \dot{R}$: Koordinate bzw. Geschwindigkeit der Relativbewegung;
 M : Masse des Projektils;
 μ : reduzierte Masse der Relativbewegung

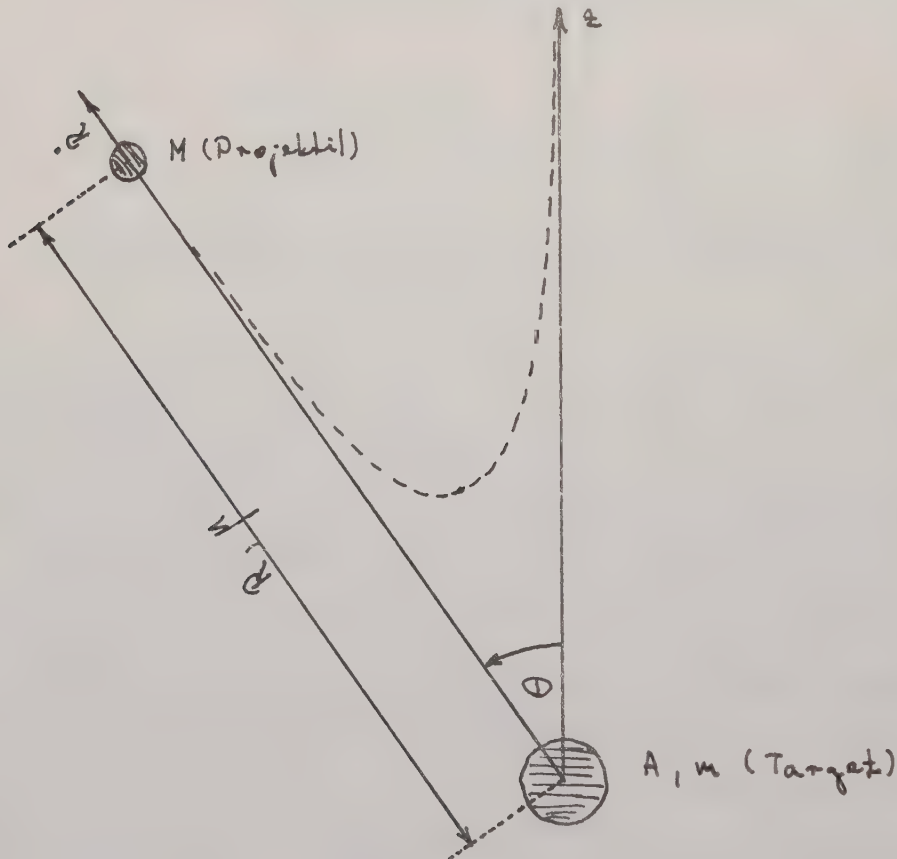


Abbildung 5.1: Geometrie des Projektil-Target Systems

Für Weitere wählen wir ein eindimensionales Problem, es bewegt sich nämlich das stoßende Projektil-Target System entlang einer Geraden. Die Abbildung 5.2 zeigt die Geometrie dieser Situation.

G_v : Schwerpunkt des Vibrators

G_s : Schwerpunkt des Systems

$\xi_e/2$: Kernradius im Gleichgewichtszustand ($R = \infty$)

$\xi/2$: Kernradius im angeregten Zustand

ω : Drehwinkelgeschwindigkeit des Vibrators

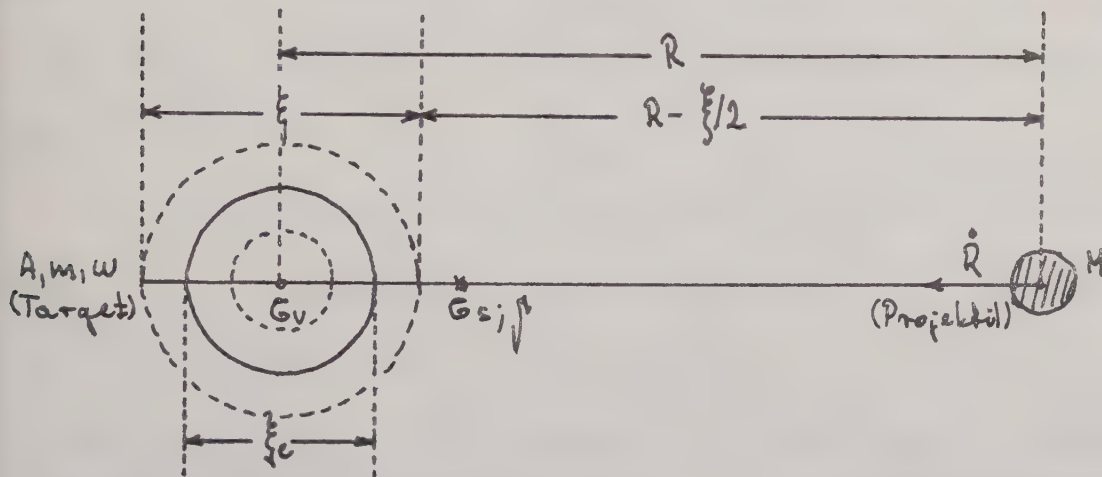


Abbildung 5.2 : Geometrie einer eindimensionalen Bewegung des kollinearen Stoßes zwischen dem Vibratorkern (Target) und einem schweren Teilchen (Projektil). (Ursprung des Koordinatensystems ist der Punkt G_s)

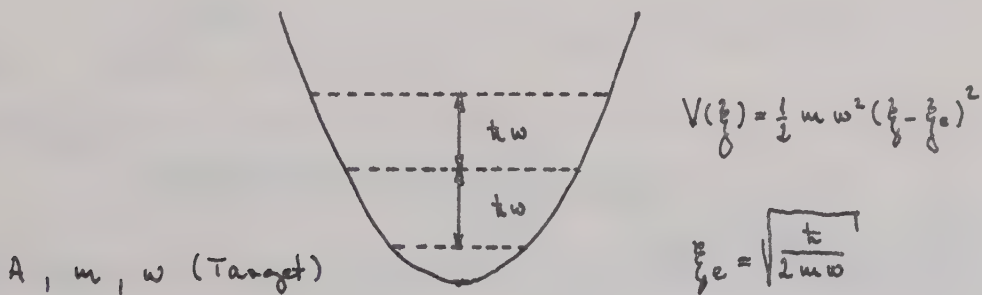


Abbildung 5.3 : Das Target - als Vibratorkern - realisiert durch einen harmonischen Oszillator

5.2. Die Beschreibung des Oszillatorsystems

Die gesamte Lagrangefunktion lautet

$$L = L_1(R, \dot{R}, t) + L_2(\xi, \dot{\xi}, t) + L_{1,2}(R; \xi, t), \quad (5.1a)$$

dabei sind die einzelnen Lagrangefunktionen folgende:

$$L_1(R, \dot{R}) = \frac{1}{2} \mu \dot{R}^2 \quad (\text{Projektil}) \quad (5.1b)$$

mit der reduzierten Masse der Relativbewegung μ ; die Lagrangefunktion des Oszillators (in Normalkoordinaten)

$$L_2(\xi, \dot{\xi}) = \frac{m}{2} \dot{\xi}^2 - \frac{m}{2} \omega^2 \xi^2 \quad (\text{Oszillator}) \quad (5.1c)$$

Die Wechselwirkung wird linear in der Oszillatorkoordinate

$$L_{1,2}(R; \xi) = V(R) \xi \quad (\text{Kopplung}), \quad (5.1d)$$

wobei $V(R)$ zunächst beliebige Funktion von R ist. Damit erhält man das Matrixelement $U_{n,n'}[R; t'', t']$ des Propagators $K_{R(t)}(\xi'', t'' | \xi', t') \equiv \hat{U}[R(t); t'', t']$ unmittelbar (Fe.65), (Schu.81):

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{U}[R(t); t'', t'] | 0 \rangle &= \langle n | K_{R(t)}(\xi'', t'' | \xi', t') | 0 \rangle \\ &= (n!)^{-\frac{1}{2}} (i t_0^*)^n \langle 0 | \hat{U}[R(t); t'', t'] | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (5.2a)$$

mit

$$t_0 = t_0(\omega) = (2\pi\omega m)^{-\frac{1}{2}} \int_{t'}^{t''} V(R(t)) e^{-i\omega t} dt \quad (5.2b)$$

und

$$\begin{aligned} \beta &= \langle 0 | \hat{U}[R; t'', t'] | 0 \rangle = e \\ &\quad - (2\pi\omega m)^{-\frac{1}{2}} \int_{t'}^{t''} dt \int_{t'}^t d\tau V(R(t)) V(R(\tau)) e^{-i\omega(t-\tau)} \end{aligned} \quad (5.2c)$$

Bemerkungen:

(1) Hinaus ergibt sich das Einflußfunktional

$$F_\omega[R, \tilde{R}] = e^{i\Phi_\omega[R, \tilde{R}]}$$

wobei

$$\Phi_w[R; \tilde{R}] = - (i 2\pi \omega_w)^{-1} \times \int_{t'}^{t''} \int_{t'}^{t''} dt d\tau [V_w(R(t)) - V_w(\tilde{R}(t))] \cdot [e^{-i\omega(t-\tau)} V_w(R(\tau)) - e^{i\omega(t-\tau)} V_w(\tilde{R}(\tau))]$$

ist und das totale Funktional der Oszillatorverteilung

$$\Phi[R; \tilde{R}] = \int_0^\infty \Phi_w[R; \tilde{R}] d\omega.$$

(2) Dieses Ergebnis des Oszillatorproblems ist näherungs-
ungsfrei.

* * *

* * *

5.3. Formulierung des Modells von Pechukas

Das physikalische System besteht aus einem entlang einer Geraden stoßenden Vibratorkern (mit Anregungsmöglichkeit infolge der Streuung) und aus einem schweren Teilchen (ohne Anregung).

Wir wollen die durch den Stoß erzeugte Übergangswahrscheinlichkeit $\hat{P}_{n0}$ des Vibratorkerns berechnen.

Das Koordinatensystem zeigt die Abbildung 5.2, wobei m die Targetmasse und M die Projektilmasse bzw. $\mu^{-1} = m^{-1} + M^{-1}$ die Reduziertmasse ist.

Der Hamiltonoperator des Gesamtsystems ist

$$\hat{H} = \hat{H}_1(R, P) + \hat{H}_2(\xi, \eta) + \hat{H}_{1,2}(R, \xi), \quad (5.6)$$

dabei wählen wir die einzelnen Operatoren folgenderweise

$$\hat{H}_1(R, P) = \frac{1}{2\mu} P^2, \quad (5.7a)$$

und

$$\hat{H}_2(\xi, \eta) = \frac{1}{2m} (\eta^2 + m^2 \omega^2 \xi^2), \quad (5.7b)$$

ferner

$$\hat{H}_{1,2}(R, \xi) = \left(\frac{2\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \xi V(R(t)). \quad (5.7c)$$

Als spezieller Ansatz repräsentiert das Rosen-Zener (Ro. 32) Potential

$$V(R) = \lambda \tilde{V}_0 \operatorname{sech}(\lambda R) = V_0 \operatorname{sech}(\lambda R) \quad (5.8)$$

die Wechselwirkung zwischen den Untersystemen: $\hat{H}_1$ und $\hat{H}_2$, bzw. dem Projektil und Target.

Zum weiteren Gebrauch führen wir noch die Abkürzung

$$\hat{H}_0 \approx \hat{H}_1 + \hat{H}_{1,2} = \hat{H} - \hat{H}_2$$

ein.

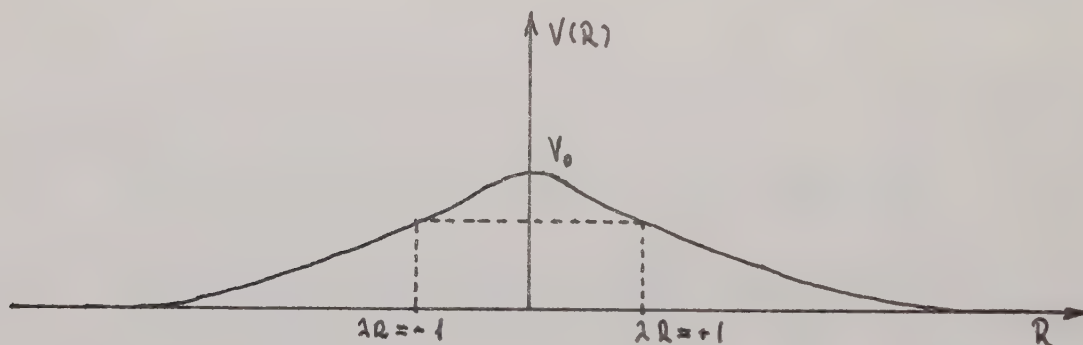


Abbildung 5.4 Das Rosen-Zener Potential: $V(R) = V_0 f(R)$, $f(R) = \operatorname{sech}(\lambda R) = (\cosh(\lambda R))^{-1}$. Dabei bezeichnet λ den "suddenness" - Parameter; V_0 ist Wechselwirkungsstärke.

Für explizite Rechnungen wurden folgende Parameter gewählt: $M = 1$ Protonenmasse; $m = AM \gg M$ also $\mu \approx m$ und $\hbar\omega \approx 41\sqrt{A} [\text{MeV}]$, wobei A die Massenzahl des Targetkern ist.

5.3.1. Die Lösung des Modells

Unter Beachtung der früheren Formulierung erhält man:

- (1) Die Schrödinger-Gleichung des Vibrators mit Wechselwirkungsterm

$$i\hbar \partial_t \hat{U}(R(t); t, t') = \hat{H}_0[R(t)] \hat{U}(R(t); t, t'), \quad \hat{U}(R(t); t, t') = \hat{1}. \quad (5.9)$$

- (2) Die semiklassische Bewegungsgleichung des Projektils:

$$\mu \ddot{R}(t) = -Re \frac{\langle n | \hat{U}(R(t); t'', t') \partial_R \hat{H} \hat{U}(R(t); t, t') | 0 \rangle}{\langle n | \hat{U}(R(t); t'', t') | 0 \rangle} \quad (5.10a)$$

oder integriert

$$\dot{R}^2(t) = 2\mu^{-1} (E - Re H_{n0}[R(t)]), \quad (5.10b)$$

wobei $E = H[\infty; t]$ ist, und es gilt:

$$H_{n0}[R(t); t] = \frac{\langle n | \hat{U}(R(t); t'', t') \hat{H}[R(t)] \hat{U}(R(t); t, t') | 0 \rangle}{\langle n | \hat{U}(R(t); t'', t') | 0 \rangle}. \quad (5.11)$$

Um die Gleichung (5.9) zu lösen, ergeben sich an dieser Stelle zwei Möglichkeiten, nämlich:

- (1) Im speziellen Fall des Oszillatorproblems mit linearem Wechselwirkungsterm (5.1d) läßt sich das Matrixelement $H_{n0}[R(t); t]$ explizit analytisch erhalten:

$$H_{n0}[R(t); t] = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_0)t} \langle \phi_n(t) | \hat{H}_0 + \hat{H}_{1,2} | \phi_0(t) \rangle, \quad (5.12a)$$

oder

$$e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_0)t} * H_{n,10}[R(t); t]$$

$$= \left(\frac{1}{2} + n \frac{L(R(t))}{L_0} + L(R(t)) \tilde{L}^*(R(t)) \right) \hbar \omega + iV(R(t)) \left(L(R(t)) e^{-i\omega t} - L^*(R(t)) e^{i\omega t} - \frac{L}{L_0} \right) \quad (5.12b)$$

mit Formel (5.2b) für L_0 und ferner:

$$L(R(t)) = -\hbar^{-1} \int_{t_1}^t e^{i\omega t} V(R(t)) dt, \text{ d.h.: } L_0 = L(R(t_1)) \quad (5.12c)$$

$$L^*(R(t)) = -\hbar^{-1} \int_{t_1}^t e^{-i\omega t} V(R(t)) dt \quad \text{mit} \quad V^*(R(t)) = V(R(t)). \quad (5.12d)$$

Damit ist $H_{\omega 0}(R(t))$ für jede beliebige Trajektorie $R(t)$ bekannt. Die Bewegungsgleichung (5.10) muß dann (in allgemeinen numerisch) gelöst werden.

(2) Falls ein komplizierteres Modell ohne analytisch bekannte Lösung vorliegt, muß eine numerische Methode angewandt werden. Durch die Identität:

$$\hat{U}^+(t_1; t_2) \equiv \hat{U}(t_2; t_1) \equiv \hat{U}(t_2; t) \hat{U}(t; t_1)$$

kann man die Gleichung (5.10a) in der Form

$$\mu \ddot{R}(t) = -Re \frac{\langle n | \hat{U}^{(j-1)}(R, t^-, t) (\hat{U}^{(j+1)}(R, t, t') 2\hat{H} \hat{U}^{(j)}(R, t, t') | 0 \rangle}{\langle n | \hat{U}^{(j-1)}(R, t^-, t) | 0 \rangle} \quad (j = 1, 2, \dots) \quad (5.13)$$

schreiben. Mit einer Trajektorie $R^{(0)}(t)$ lösen wir dann Gleichung (5.9) für $\hat{U}^{(0)}[R; t, t']$. Anschließend berechnet man die Gleichungen (5.9) und (5.13) simultan und zwar als Anfangswertproblem statt der Randwertaufgabe (5.9) bzw. (5.10a). Dieses Verfahren wird dann iterativ wiederholt.

5.3.2. Die Übergangswahrscheinlichkeiten des Vibrators

Definitionsgemäß sind die Übergangswahrscheinlichkeiten P_{n0} des Vibrators

$$P_{n0} \equiv \left| \langle n | \hat{U}[R(t); t^-, t'] | 0 \rangle \right|^2 = \left| U_{n0}[R(t); t^-, t'] \right|^2.$$

Hieraus erhält man die explizite Gestalt für P_{n0} ausgedrückt durch $|L_0|$:

$$P_{n0} = \frac{|L_0|^{2n} e^{-|L_0|^2}}{n!} = \frac{|L_0|^{2n} P_{00}}{n!}$$

dabei ist $P_{00} = e^{-|d_0|^2}$.

Um die Anregungswahrscheinlichkeiten zu berechnen, muß man also nur die Größe $d_0 \equiv d(R(t); t'', t')$ kennen. Sämtliche Formeln des Problems (d. h. Streuung an einem Vibrator) lassen sich durch die Größen $d = d(R(t); t, t')$, $\tilde{d} = d(\tilde{R}(t); t, t'')$ und $d_0 = d(R(t); t'', t') = d(\tilde{R}(t); t', t'')$ mit den Randwerten $R(t') = \tilde{R}(t') = R'$ und $R(t'') = \tilde{R}(t'') = R''$ ausdrücken, wobei

$$d = d(R(t); t, t_0) = -\hbar^{-1} \int_{t_0}^t V(R(s)) e^{i\omega s} ds$$

ist. Man kann die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_{n0}(t'', t') = 1$$

beweisen:

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_{n0}(t'', t') = e^{-|d_0|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(|d_0|^2)^n}{n!} = e^{-|d_0|^2} e^{|d_0|^2} = 1.$$

Dieser Beweis gilt, wenn $R(t)$ unabhängig von n ist.

5.3.3. Asymptotische Ausdrücke für die rückwirkungsfreien Lösungen

Um die noch kommende Diskussion zu erleichtern, wollen wir hier noch die asymptotischen Werte der Matrixelemente $H_{n0}(R(t), t)$ und Wahrscheinlichkeiten P_{n0} angeben.

In unserem Beispiel haben wir $t' = -T_0$, $t'' = +T_0$ und eine gerade Funktion $V(t) = V_0 f((R(t)) - s$. Formel (5.8) - gewählt. Mit der gewählten Funktion kann man die Integrale $d(t)$, $\tilde{d}(t)$ usw. im allgemeinen nicht mehr analytisch berechnen. (Die Situation verschlechtert sich noch weiter im selbstkonsistenten Fall, wo eine analytische Behandlung infolge der komplizierten $R(t)$ hoffnungslos ist.)

Stellen wir nun die Randbedingungen im Unendlichen, also $T \rightarrow \infty$. In diesem Fall erhält man für die Größe L_0 und $L(t=0)$ die folgenden asymptotischen Formeln:

$$L(0) = -\frac{1}{\lambda} V_0 \int_{-\infty}^0 (\cosh(\lambda v t))^{-1} e^{i\omega t} dt = -\frac{1}{\lambda} V_0 \left(\frac{1}{2\lambda v} \left(\tanh\left(\frac{\omega T}{2\lambda v}\right) - \frac{1}{i} \operatorname{arctg}\left(\frac{\omega}{\lambda v}\right) \right) \right),$$

und

$$L_0 = -\frac{1}{\lambda} V_0 \int_{-\infty}^{+\infty} (\cosh(\lambda v t))^{-1} e^{i\omega t} dt = -\frac{V_0 \pi}{\lambda v} \operatorname{sech}\left(\frac{\omega T}{2\lambda v}\right)$$

durch die Symmetrieeigenschaften:

$$L^* = -L(-t) \text{ und } f(R(-t)) = f(R(t)) \text{ mit } R(t) = vt.$$

Dadurch ergeben sich explizite Ausdrücke für die entsprechenden Matrixelemente:

$$H_{00}(0) = -L(0)^2 \hbar \omega + i 2 L(0) V_0$$

und

$$H_{n0}(0) = H_{00}(0) + \frac{L(0)}{L_0} n \hbar \omega - i \frac{V_0}{L_0} n$$

Die Wahrscheinlichkeiten sind

$$P_{n0} = \frac{|L_0|^{2n}}{n!} P_{00}, \quad P_{00} = e^{-|L_0|^2}.$$

Einige Grenzwerte dieser asymptotischen Formeln für große und kleine Werte der Parameter ν , $k\omega$ und $U_0 \approx V_0$ zeigt die Tabelle:

Formel Parameter	L_0	$L(0)$	P_{n0} ($n > 0$)	P_{nn} ($n = 0, 1, \dots$)	$H_{n0}(0)$ ($n > 0$)	$H_{nn}(0)$ ($n = 0, 1, \dots$)
$\nu \rightarrow 0$	0	$i \frac{U_0}{k\omega}$	0	1	$-\frac{U_0^2}{k\omega} + n \frac{k\omega}{2}$	$-\frac{U_0^2}{k\omega}$
$\nu \rightarrow \infty$	0	0	0	1	$n \frac{k\omega}{2} - i n \frac{k\omega}{4}$	0
$k\omega \rightarrow 0$	$-\frac{\pi U_0}{k\omega}$	$-\frac{\pi U_0}{2k\omega}$	$\frac{ L_0 ^{2n} P_{00}}{n!}$	$\frac{(1 - n L_0 ^2)^n}{n! P_{00}}$	$-i \left(\frac{\pi}{k\omega} \right)^n \cdot \left(U_0^2 - n \left(\frac{k\omega}{4} \right)^2 \right)$	$-i \frac{\pi U_0^2}{k\omega} (2n+1)$
$k\omega \rightarrow \infty$	0	0	0	1	$(1-i)\infty$	0
$U_0 \rightarrow 0$	0	0	0	1	$n \frac{k\omega}{2} + i(\dots)$	0
$U_0 \rightarrow \infty$	$\mp \infty$	$\mp (1+i)\infty$	0	0	∞	∞

6. Verschiedene Betrachtungsmethoden der Anregung eines Vibrators durch Streuungen

Um unsere Diskussion erweitern zu können, wollen wir einen Überblick des Vibratorproblems angeben. Sei das Problem wieder durch die Hamiltonfunktion

$$H = H_1(Q, P) + H_2(\xi, \eta) + H_{1,2}(Q; \xi, t)$$

charakterisiert, wobei H_1 das Projektil-; H_2 das Target-System und $H_{1,2}$ die Wechselwirkung zwischen den Systemen bezeichnet. Es sind nun folgende Formulierungen des Problems möglich:

I., Klassisch

- I.1) ohne Selbstkonsistenz (H_1 und H_2 sind klassische H.-Funktionen)
- I.2) mit

II., Semi-klassisch

- II.1) ohne Selbstkonsistenz (H_1 ist klassisch; $\hat{H}_2$ und $\hat{H}_{1,2}$ sind quantenmechanisch)
- II.2) mit

III., Quantenmechanisch

- III.1) ohne Selbstkonsistenz (Born-Oppenheimer)
- III.2) mit Selbstkonsistenz (Hartree-Fock)

6.1. Klassische Betrachtung

Die Bewegungsgleichungen lauten

$$\mu \ddot{R}(t) = - \frac{\partial}{\partial R} V(R; \xi), \quad (6.1)$$

$$m \ddot{\xi}(t) = - m \omega^2 (\xi(t) - \xi_0) - \frac{\partial}{\partial \xi} V(R; \xi). \quad (6.2)$$

Die Gleichungen (6.1-2) sind selbstkonsistent.

Wenn der Wechselwirkungsbereich ΔR des Potentials $V(R, \xi)$ wesentlich größer als die Schwingungsamplitude $A = (2\overline{\xi^2})^{1/2}$ (d.h.: $\Delta R \gg A$) ist, dann darf man

$$-\frac{\partial}{\partial R} V(R, \xi) \approx -\frac{\partial}{\partial R} V(R, \xi_e) = F(R) \quad (6.3)$$

ersetzen. Damit wird die Gleichung (6.1) ξ -unabhängig sein, folglich kann man sie unmittelbar lösen und die Trajektorie $R = R(t)$ erhalten.

Das System

$$\mu \ddot{R}(t) = - \frac{\partial V(R, \xi_e)}{\partial R} = F(R) , \quad (6.4)$$

$$m \ddot{\xi}(t) = - m \omega^2 (\xi - \xi_e) - \frac{\partial}{\partial \xi} V(R, \xi) \quad (6.5)$$

ist nicht mehr selbstkonsistent; der Oszillator hat keine Rückwirkung auf die Relativbewegung $R(t)$ in (6.4). Diese Näherung ist nur dann erlaubt, wenn $E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} \mu \dot{R}^2 \gg \Delta E_{\text{osz}}$ gilt, wobei ΔE_{osz} die Vibrationsenergieänderung infolge des Stoßes ist. Durch die Trajektorie $R = R(t)$ von Gleichung (6.4) kann man die gesuchte Lösung des Vibrators $\xi = \xi(t)$ erhalten, wenn die Anfangsbedingung für Vibrator bekannt ist.

* * *

Bemerkungen über die explizite Gestalt des Potentials $V(R, \xi)$:

Wir haben zuvor schon angenommen, daß unser Wechselwirkungspotential folgende Struktur hat:

$$V(R, \xi) = f(R) \cdot \xi .$$

Das können wir als den ersten Term einer Taylor-Entwicklung (nach der Variablen ξ) der Potentialfunktion

$$V(R, \xi) = V(R - \frac{1}{2}\xi) \quad (6.6)$$

ansehen. Mit diesem allgemeineren Potential, das vom momentanen Abstand zwischen Oszillatorkoordinate und

Projektilkoordinate abhängt, können wir das System (6.1) - (6.2) streng lösen. Durch die Transformation (Wu. 62, 63) $x = \xi - \xi_e$ und $y = R - \frac{1}{2}\xi$ läßt sich das System (6.1-2) in neuer Gestalt

$$\ddot{x}(t) + \omega^2 x(t) - \frac{2}{m} \frac{dV(y)}{dy} = 0, \quad (6.7)$$

$$\ddot{y}(t) - \frac{m}{2} \omega^2 x(t) + \frac{2}{\mu} \frac{dV(y)}{dy} = 0, \quad (6.8)$$

schreiben. Das System (6.7-8) ist also wieder eine selbst-konsistente Formulierung.

Durch den Ansatz (6.6) ergibt sich der Term in (6.2) in der Form:

$$- \frac{\partial}{\partial \xi} V(R - \frac{1}{2}\xi) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial R} V \approx - \frac{1}{2} F(R).$$

Dadurch ist die Lösung von Gl. (6.5)

$$\xi - \xi_e = A \sin(\omega t + \delta) - \frac{1}{2m\omega} \int_{-\infty}^t F[R(\tau)] \sin \omega(t-\tau) d\tau,$$

dabei repräsentiert der erste Term den Vibrationszustand vor dem Stoß und der zweite Term dessen Störung durch die Streuung. Der klassische Energiegewinn ΔE_{kl} des Vibrators ist:

$$\Delta E_{kl} = \frac{1}{2} m \omega^2 \left(\frac{1}{2m\omega} \right)^2 \left| \int_{-\infty}^{+\infty} F e^{i\omega t} dt \right|^2 - \left(\frac{A}{m\omega} \right) \cos \delta \int_{-\infty}^{+\infty} F e^{i\omega t} dt.$$

Wenn man den Mittelwert der übertragenen Energie ΔE_{kl} über die Anfangsphase- δ bildet, ergibt sich das Resultat:

$$\overline{\Delta E_{kl}} = \frac{1}{2} m \omega^2 \left| \frac{1}{2m\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t} F(R(t)) dt \right|^2. \quad (6.9)$$

Ein wichtiges Ergebnis ist: der statistische mittlere Energiegewinn $\overline{\Delta E_{kl}}$ des Vibrators ist unabhängig von seiner Anfangsenergie, die durch A bestimmt ist. Quantenmechanisch kann man auf den Vibrator Energie nur unter Beachtung des Gesetzes $\Delta E^{Vib} = n \cdot h\omega$ mit $n \geq 0$ und n ganze Zahl übertragen. Man kann aber die Relation

(6.9) als den statistischen mittleren Energiegewinn des Vibrators pro Stoß ansehen.

Weil der auf die Relativbewegung wirkende Term der totalen Wechselwirkung $V(R; \xi)$ im Gleichungssystem (6.4-5) nicht berücksichtigt worden ist, ergibt deshalb diese nicht selbstkonsistente Betrachtung des Systems zwei künstliche Ergebnisse, nämlich:

- (1) Wenn $\frac{1}{2} \mu v^2 = E_{kin} \gg \Delta E_{kin}^{Vibr}$ gilt, d. h. die Translationsenergie E_{kin} sehr hoch zur Vibrationsenergieänderung ΔE_{kin}^{Vibr} ist, dann hat der Vibrator keine Möglichkeit durch Stoß Energie abzugeben.
- (2) Der statistische Energieübertrag $(\overline{\Delta E_{kin}^{Vibr}})$ des Vibrators ist unabhängig vom Anfangszustand. Dieses Ergebnis gilt für die semiklassische Betrachtung auch, d. h. $(\overline{\Delta E_{kin}^{Vibr}})$ ist unabhängig von der Anfangsenergie des Vibrators (siehe unten).

Für den Fall $\frac{1}{2} \mu v^2 \sim \hbar \omega$ ändert sich die Situation: die Vibrationsenergie wird durch den Stoß sinken, wenn man die Rückwirkung auf die Bahn (Energieverlust) berücksichtigt.

6.2. Semiklassische - nicht selbstkonsistente - Behandlung des Streuproblems

Die Bewegungsgleichungen sind

$$\mu \ddot{R}(t) = F(R(t)) \quad , \quad \text{mit} \quad F(R) = - \frac{\partial}{\partial R} V(R; \xi) \quad , \quad (6.10)$$

$$- \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} + \left(\frac{m\omega^2}{2} (\xi - \xi_e)^2 + \frac{1}{2} (\xi - \xi_e) F(t) \right) \psi = i\hbar \partial_t \psi \quad . \quad (6.11a)$$

Die letzte Gleichung lautet in abstrakter Form:

$$(\hat{H}_\xi(\xi) + \hat{H}_{int}(R; \xi)) |\psi\rangle = i\hbar \partial_t |\psi\rangle \quad . \quad (6.11b)$$

Die Gleichung der Relativbewegung ist also klassisch; den Vibrator wollen wir quantenmechanisch behandeln. Zuerst müssen wir aus Gl.(6.10) die Trajektorie $R(t)$ berechnen, dann kann man die Schrödinger-Gleichung (6.11) lösen. Wir suchen diese Lösung durch den Ansatz:

$$|\Psi\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \Psi \rangle = \sum_n a_n |\phi_n\rangle,$$

mit

$$a_n = \langle \phi_n | \Psi \rangle,$$

dabei ist das orthonormierte

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm},$$

und vollständige

$$\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = \mathbb{1}.$$

System $|\phi_n\rangle$ durch

das ungestörte Oszillatorproblem definiert, d. h.

$$\hat{H}_0 |\phi_n\rangle = i\hbar \partial_t |\phi_n\rangle, \quad |\phi_n(t)\rangle = |n\rangle$$

mit den stationären Eigenzuständen

$$\hat{H}_0 |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle.$$

(6.12)

Unser Ansatz für $|\Psi\rangle$ lautet:

$$|\Psi\rangle = \sum_n a_n |\phi_n\rangle = \sum_n a_n(t) e^{-i\varepsilon_n \omega t} |n\rangle$$

folglich

$$\Psi(\xi, t) = \langle \xi | \Psi \rangle = \sum_n a_n(t) e^{-i\varepsilon_n \omega t} \langle \xi | n \rangle$$

ist. Die Oszillatorwellenfunktion $\langle \xi | n \rangle$ läßt sich durch Hermite-Polynome ausdrücken:

$$\psi_n(\xi) = \langle \xi | n \rangle = N_n H_n(c(\xi - \xi_0)) e^{-\frac{1}{2}(c(\xi - \xi_0))^2}$$

(6.13)

dabei sind

$$c^2 = \frac{m\omega}{\hbar} \quad \text{und} \quad N_n = \left(\frac{c}{\sqrt{\pi}} 2^n n! \right)^{-\frac{1}{2}}.$$

Die Hermite-Polynome sind definiert durch die Rekursionsrelation:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \left(\frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \right).$$

Durch unseren Ansatz läßt sich die Gl. (6.11) separieren, es ergibt sich die folgende gewöhnliche Differentialgleichung für die Funktion $a_n(t)$:

$$i\hbar \dot{a}_n(t) = \sum_j \frac{1}{2} \langle n | \xi - \xi_e | j \rangle a_j(t) F(t) e^{i(n-j)\omega t} \quad (6.14)$$

dabei ist das Kopplungsmatrixelement

$$\langle n | \xi - \xi_e | j \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_n(\xi) (\xi - \xi_e) \phi_j(\xi) d\xi.$$

Die Gleichung (6.14) läßt sich näherungsweise durch die Perturbationsmethode lösen. In diesem Fall erhält man für die Übergangswahrscheinlichkeit in erster Ordnung

$$P_{n0}^{SU} = |a_n(\infty)|^2 \cong (4\pi^2)^{-1} |\langle n | \xi - \xi_e | 0 \rangle|^2 \left| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i n \omega t} F(t) dt \right|^2.$$

Für das Matrixelement $\langle n | \xi - \xi_e | 0 \rangle$ ergibt sich

$$|\langle n | \xi - \xi_e | 0 \rangle|^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} J_n.$$

Hieraus sind die gesuchten Größen P_{10}^{SU} und ΔE_{SU} durch folgende Relationen gegeben:

$$P_{10}^{SU} = \frac{1}{8\pi^2 m \omega} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i \omega t} F(t) dt \right|^2 \quad (6.15)$$

und

$$\Delta E_{SU} = \hbar \omega P_{10}^{SU} = \frac{\hbar}{8\pi^2 m} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i \omega t} F(t) dt \right|^2. \quad (6.16)$$

Man erkennt gleich, daß die Formen (6.9) und (6.16) identisch sind.

Die klassische und semiklassische Betrachtung des Vibratorproblems ergibt also das gleiche Resultat für den Energieübertrag an den Vibrator, obwohl man die Übergangswahrscheinlichkeiten P_{nm} des Vibrators keinesfalls klassisch berechnen könnte.

Wenn der Anfangszustand des Vibrators nicht der Grundzustand ist, erhält man den Energieübertrag definitionsgemäß als

$$\Delta E_{SU} = \hbar \omega (P_{n+1,n}^{SU} - P_{n-1,n}^{SU}). \quad (6.17)$$

Die Größe P_{nm} für das Ereignis $n \rightarrow n$ des Vibrators kann man für den Fall des harmonischen Vibrators $\hat{H}_v(\xi)$ mit linearer Kopplung in ξ : $\hat{H}_{i,v}(\xi, t) = F(t)(\xi - \xi_0)$ exakt lösen (siehe u. a.: (Ba. 49), (Pe.66), (Ma.54)).

* * *

Bemerkung: Unlängst haben wir gefunden, daß das Problem für den harmonischen Vibrator $\hat{H}_v(\xi)$ mit quadratischer Kopplung in ξ , d.h.: $\hat{H}_{i,v}(\xi, t) = F(t)(\xi - \xi_0)^2$ ebenfalls exakt (analytisch) lösbar ist (s.: (Ca.71), (Go.72,73) und (Kh.75)).

Das Resultat für P_{nm} ($n \geq m \geq 0$) lautet

$$P_{nm} = ((n-m)!)^{-1} |d_0|^{2(n-m)} e^{-|d_0|^2} \sum_{k=0}^n \sum_{l=0}^{n-k} |d_0|^{2(k+l)} \frac{(-2)^k (n-m)! (n+l)!}{k! l! (n-m+l)! (m-k-l)! (n-m+k+2l)!} \quad (6.18)$$

wobei

$$d_0 = -(kt)^{-1/2} \left(\frac{k}{2m\omega} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} F(t) dt, \quad (6.18')$$

und

$$d(t) = -(2t)^{-1/2} \left(\frac{k}{2m\omega} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^t e^{-i\omega \tau} F(\tau) d\tau$$

ist. Im besonderen Fall $m = 0$ ergibt sich

$$P_{n0} = \frac{|d_0|^{2n} e^{-|d_0|^2}}{n!} = \frac{|d_0|^{2n} P_{00}}{n!}.$$

Wenn $|d_0|^2 \ll 1$ ist, dann folgt aus (6.18)

$$P_{nm} = \delta_{mn} + |d_0|^2 ((m+1)\delta_{m+1,n} + m\delta_{m-1,n} - (2m+1)\delta_{m,n}). \quad (6.19)$$

Die Form (6.19) entspricht dem gewöhnlichen, störungstheoretischen Resultat. Folglich erhalten wir für die explizite Gestalt der Gleichung (6.17) störungstheoretisch wieder

$$\Delta E_{SU} = \hbar\omega (P_{n+1,n} - P_{n-1,n}) = \frac{\hbar}{2m} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t} F(t) dt \right|^2. \quad (6.20)$$

Das Ergebnis (6.20) ist unabhängig von n , d.h. der Energieübertrag an den quantenmechanisch betrachteten Vibrator ergibt sich - auch im semiklassischen Fall - anfangszustandsunabhängig (s.: S.-77; Bemerkung-2 bei dem klassischen Fall). Um über die Wahrscheinlichkeit P_{10} mehr sagen zu können, nehmen wir ein konkretes Potential

$$V(R; \xi) = \frac{1}{2} V_0 (\xi - \xi_0) F(R(t)) \quad (6.21a)$$

für gleichförmige Bewegung $R(t) = vt$ mit

$$F(R(t)) = \text{sech}(\lambda vt) . \quad (6.21b)$$

Hieraus erhält man

$$P_{10}^{su} = \frac{1}{8\pi\hbar\omega} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t} F(t) dt \right|^2 = \frac{1}{8\pi\hbar\omega} \left(\frac{V_0}{2\omega} \right)^2 \left(\frac{\beta}{2} \text{sech}\left(\frac{\beta}{2}\right) \right)^2, \quad (6.12)$$

mit dem Parameter

$$\beta = \frac{\pi\omega}{\lambda v} . \quad (6.22')$$

λ bezeichnet die Abfallkonstante des Wechselwirkungspotentials.

Man kann ablesen, daß die Übergangswahrscheinlichkeit P_{10}^{su} wächst für große Geschwindigkeit v oder Potentialsteigung λ , bzw. kleines Vibratorquantum $\hbar\omega$. Bei gegebener Stoßenergie sorgt eine kleinere Masse M für größere Geschwindigkeit v , ergibt also eine größere Anregungswahrscheinlichkeit.

Die vernachlässigte Energieänderung der Relativbewegung $R(t)$ kann beträchtlich sein, wenn die Stoßenergie $E_{kin} = \frac{1}{2} \mu v^2$ mit dem Energiequantum $\hbar\omega$ vergleichbar ist. Folglich geben die obigen Formeln nicht mehr das richtige Ergebnis. Der semiklassische Ausdruck für P_{10}^{su} wird auch im Fall $\frac{1}{2} \mu v^2 \leq \hbar\omega$ nicht verschwinden. Für solche langsamen Stoßereignisse muß man die Betrachtung wellenmechanisch durchführen.

6.3. Wellenmechanische Betrachtung dieses Streuproblems

Wir wollen die voll quantenmechanische Betrachtung des Problems betrachten, also muß die Wellenfunktion $|\Psi\rangle$ des ganzen Systems der Gleichung

$$(\hat{H}_1(R) + \hat{H}_2(\xi) + \hat{H}_{1,2}(R; \xi)) |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$$

oder in expliziter Form

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + V(\xi) + V(R; \xi) \right) \Psi = E \Psi \quad (6.23)$$

genügen, wobei E die totale Energie des Systems ist. Wir suchen die Lösung für $|\Psi\rangle$ wieder durch Entwicklung nach dem orthonormierten und vollständigen System von Vibratorzustandfunktionen $\{|u\rangle\}$ die in Gl. (6.12) und (6.13) definiert wurden. Wir setzen also an

$$\Psi(R; \xi) = \sum_j f_j(R) \varphi_j(\xi), \quad (6.24)$$

dabei wollen wir die Funktion $f_u(R)$ für den Vibratorzustand $\varphi_u(\xi)$ vor dem Stoß so normalisieren, daß

$$f_u(R) \rightarrow e^{-ik_n R} \delta_{un} + A_n e^{ik_n R}, \quad R \rightarrow \infty; \quad (6.25)$$

und

$$f_u(R) \rightarrow 0, \quad R \rightarrow -\infty \quad (6.26)$$

erfüllt sind.

k_n bezeichnet die Wellenzahl der Relativbewegung, wenn sich der Vibratorkern in seinem Zustand $\varphi_u(\xi)$ befindet. Sie ist definiert mit Hilfe der Energieerhaltung

$$E_u + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2\mu} = E.$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit für den einzelnen Stoß ist

$$P_{un} = \frac{k_n}{k_u} |A_n|^2.$$

Aus Gl.(6.23) und (6.24) erhält man das Gleichungssystem für die Funktionen $f_u(R)$:

$$\left(\frac{d^2}{dR^2} + k_u^2 \right) f_u(R) = \sum_j \langle u | W | j \rangle f_j(R), \quad (6.27)$$

mit

$$\langle n | W | j \rangle = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n(\xi) V(R; \xi) \varphi_j(\xi) d\xi. \quad (6.28)$$

Mit Hilfe der störungstheoretischen Methode können wir eine approximative Lösung des Gl.systems (6.27-28) erhalten. Unser Ansatz: wir wollen die nicht-diagonalen Matrixelemente $\langle n | W | m \rangle$ $n \neq m$ als kleine Größe annehmen.

Hieraus ergibt sich die erste Approximation der Lösung durch das Gl.system

$$\left(\frac{d^2}{dR^2} + k_n^2 - \langle n | W | n \rangle \right) f_n(R) = 0, \quad (6.29)$$

$$\left(\frac{d^2}{dR^2} + k_n^2 - \langle n | W | n \rangle \right) f_n(R) = \langle n | W | m \rangle f_m(R). \quad (6.30)$$

Zuerst lösen wir die Gl. (6.29) für $f_n(R)$, dann setzt man dieses $f_n(R)$ in Gl. (6.30) ein, damit bekommen wir die erste Näherungslösung für $f_n(R)$. Aus diesem $f_n(R)$ und seiner asymptotischen Form (6.25) berechnet man die gesuchte Größe A_n und dadurch die Wahrscheinlichkeit P_{nm} .

Für eine explizite Betrachtung nehmen wir das Potential (6.24a-b) mit linearer Kopplung zum Mikrosystem also

$$V(R; \xi) = \frac{V_0}{2} (\operatorname{sech}(2R)) (\xi - \xi_c).$$

Die Matrixelemente dieses Potentials sind:

$$\begin{aligned} \langle n | V | n \rangle &= \langle m | V | m \rangle = 0, \\ \langle n | V | m \rangle &= \frac{V_0}{2} (\cosh(2R))^{-1} \langle n | \xi - \xi_c | m \rangle. \end{aligned}$$

Im besonderen Fall $m=0$, $n=1$ gilt

$$\langle 1 | V(R; \xi) | 0 \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{V_0}{2} \right) (\cosh(2R))^{-1},$$

dann lautet das Gleichungssystem der Funktionen $f_n(R)$ und $f_m(R)$:

$$f_n''(R) + k_n^2 f_n(R) = 0 ,$$

$$f_n''(R) + k_n^2 f_n(R) = \frac{V_0}{2 \cosh(\lambda R)} f_n(R) \langle n | \frac{1}{2} - \frac{1}{2} | m \rangle .$$

Damit ergibt sich die quantenmechanische Anregungswahrscheinlichkeit (6.31)

(6.31)

* * *

Bemerkungen:

- (1) Für spezielle Potentiale (z. B. Exponentialpotential: $V(R, \frac{1}{2}) = V_0 e^{-\lambda(R-1/2)}$) kann man beweisen (Ze.32), daß die quantenmechanische P_{10}^{qm} mit der symmetrisierten semiklassischen Übergangswahrscheinlichkeit P_{10}^{skl} (d. h. man nimmt in der vorliegenden Form für P_{10}^{skl} den symmetrisierten Wert $(\frac{1}{2}(v_i + v_f))$ statt der Geschwindigkeit v) praktisch ausreichend übereinstimmt.

Aber diese Übereinstimmung wird ihren Sinn bei der Schwellenenergie verlieren.

- (2) Die "Äquivalenz" zwischen quantenmechanischer und - in der Geschwindigkeit symmetrisierte - semiklassischer Betrachtung der Übergangswahrscheinlichkeiten wird abhängig von dem Potentialtyp sein.

Man kann erwarten, daß sich die Größe P_{10}^{qu} an der Schwelle erheblich größer als P_{10}^{su} ergibt, wenn die folgenden Bedingungen erfüllt sind

$$\frac{\hbar^2 k_1^2}{2\mu} < V_0 \quad \text{und} \quad \frac{\hbar^2 k_0^2}{2\mu} \approx \hbar\omega.$$

Das langsame Teilchen wird durch die Anziehungskraft des Potentials im Wechselwirkungsbereich beschleunigt und die größere Geschwindigkeit steigert die Anregungswahrscheinlichkeit.

* * *

* * *

7. Diskussion der numerischen Ergebnisse

Wir geben in diesem Abschnitt einen kurzen Überblick über die Ergebnisse des einfachen Vibratormodells für die Streuprozesse. Wie das Problem eines einzelnen Oszillators mit einer kontinuierlichen Verteilung unabhängigen Oszillatoren zusammenhängt, haben wir schon diskutiert.

Das Problem war die exklusive - bzw. inklusive Übergangswahrscheinlichkeit des kollinearen stoßenden Systems bestehend aus einem schweren Projektil und einem Vibratorkern semiklassisch zu berechnen. Wir betrachten Relativbewegung klassisch und die Anregung des Vibrators quantenmechanisch.

7.1. Über die Lösungsmethode der Gleichungen des Problems

Die Randwertaufgabe besteht aus der Schrödinger-Gleichung

$$i \hbar \partial_t \hat{U}(R(t); t, t') = (\hat{H}_v(\xi) + \hat{H}_{v,2}(R(t); \xi)) \hat{U}(R(t); t, t'), \quad (7.1)$$

mit $\hat{U}(R(t); t', t') = \hat{1}$,
und der Bewegungsgleichung

$$\dot{R}(t) = \frac{1}{\mu} \left(E - \text{Re} \frac{\langle n | \hat{U}(R(t); t, t') \hat{H}_0(R(t); \xi) \hat{U}(R(t); t, t') | 0 \rangle}{\langle n | \hat{U}(R(t); t, t') | 0 \rangle} \right), \quad (7.2a)$$

, oder in Kurzform:

$$\dot{R}(t) = \frac{1}{\mu} \left(E - \text{Re} H_{n0}(R(t); t) \right), \quad (7.2b)$$

mit $R(t') = R'$, $R(t'') = R''$. Die Gl. (7.1) läßt sich auch schreiben als

$$i \hbar \partial_t |\phi_n(t)\rangle = (\hat{H}_v(\xi) + \hat{H}_{v,2}(R(t); \xi)) |\phi_n(t)\rangle. \quad (7.3)$$

Dabei wurden die zeitabhängigen Zustände

$$|\phi_0(t)\rangle = \hat{U}(R(t); t, t')|0\rangle,$$

und (7.5)

$$|\phi_n(t)\rangle = \hat{U}(R(t); t'', t)|n\rangle,$$

mit den Randbedingungen

$$|\phi_0(t')\rangle = |0\rangle \quad \text{und} \quad |\phi_n(t'')\rangle = |n\rangle \quad (7.6)$$

eingeführt.

Als konkrete Darstellung der oben beschriebenen allgemeinen Methode nehmen wir die Ergebnisse unseres Modells. Nach Gl.-n (5.12a-b) bzw. (5.12c-d) lauten die Matrixelemente $H_{no}(R(t); t, t')$ bzw. die Übergangswahrscheinlichkeiten des Mikrosystems:

$$H_{no}(R(t); t) = \langle \phi_n(t) | \hat{H}_2 + \hat{H}_{12} | \phi_0(t) \rangle$$

$$= \left(\frac{1}{2} + \frac{t(t)}{t_0} n + t(t) \tilde{t}^*(t) \hbar \omega + i V(R(t)) \left(\alpha(t) e^{-i\omega t} - \tilde{t}^*(t) e^{i\omega t} - \alpha_0^{-1} e^{i\omega t} \right) \right),$$

bzw.:

$$P_{no} = \left| \langle n | \hat{U}(R(t); t'', t) | 0 \rangle \right|^2 = \left| H_{no}(R(t); t'', t) \right|^2$$

mit

$$\frac{|\alpha_0|^{2n} e^{-|\alpha_0|^2}}{n!} = \frac{|\alpha_0|^{2n} P_{00}}{n!},$$

$$P_{00} = e^{-|\alpha_0|^2}.$$

Mit einer vorgegebenen Trajektorie $R^{(0)}(t)$ kann man nun das Matrixelement $H_{no}(R(t), t)$ berechnen, damit ist die Gl. (7.1) lösbar für $\hat{U}(R(t); t, t')$, dann erhält man aus (7.2a) oder (7.2b) eine neue Trajektorie $R^{(1)}(t)$. Dieser iterative Prozeß wird fortgesetzt bis die vorgeschriebene Konvergenzgenauigkeit ε erreicht ist.

Das Lösungsverfahren besteht also aus folgenden Schritten:

- (i) Man berechnet den Operator $\hat{U}(R(t); t'', t')$ (bzw.: $H_{no}(R(t); t'', t')$ dabei nehmen wir an, daß die Trajektorie $R(t)$ exakt - oder näherungsweise

bekannt ist. Die Lösung erhält man durch numerische Integration.

- (ii) Im Fall daß die analytische Berechnung des Matrixelements U_{n0} nicht geht; um $\hat{U}$ zu erhalten, muß man die Vollständigkeit des Fundamentalsystems $\{|\phi_k(t)\rangle\}$ ausnützen. Dabei ist

$$\hat{U}(R(t); t, t') = \sum_{k=0}^{\infty} |\phi_k(t)\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_k(t-t')} \langle \phi_k(t')|.$$

- (iii) Man bestimmt eine verbesserte Näherung der Relativbewegung $R(t)$ durch Integration der Randwertaufgabe der semiklassischen Gleichung.

Von diesen Schritten ist der Dritte am aufwendigsten. Man wählt einen Übergang $0 \rightarrow n$, und dadurch eine Energiefläche $H_{n0}(R(t); t)$, damit löst man eine Anfangswertaufgabe für $\hat{U}^0(R(t); t, t')$ hieraus erhält man eine neue Trajektorie, damit berechnet man die nächste Operatornäherung $\hat{U}^{(1)}(R(t); t, t')$ etc.

Die Iteration wird beendet, wenn eine vorgegebene Genauigkeit ε erreicht ist, daß heißt wenn

$$|\hat{U}_{n0}^{(i+1)} - \hat{U}_{n0}^{(i)}| < \varepsilon$$

gilt. In den praktischen Rechnungen wurde $\varepsilon \leq 10^{-6}$ gewählt. Die im nächsten Abschnitt beschriebenen numerischen Rechnungen zeigten das folgende Konvergenzverhalten. Gewöhnlich lag die Anzahl der Iterationen N bei elastischen Übergängen $0 \rightarrow 0$ (oder $m \rightarrow m$) im Intervall

$$3 \leq N \leq 6.$$

Für inelastische Stöße $0 \rightarrow n$ wird die Geschwindigkeit $\dot{R}(t)$ der Fragmente im Wechselwirkungsbereich nicht mehr konstant bleiben, folglich stellt die Wahl der Energieoberfläche $H_{n0}(R(t), t)$ keine ausgezeichnete Näherung dar. Das Matrixelement H_{n0} ist also nun auch von $\dot{R}(t)$ abhängig. Das dynamische internukleare Potential $H_{n0}(R(t), \dot{R}(t), t)$ ist zwischen den adiabatischen Potentialen $H_{00}(R(t), t)$ und $H_{nn}(R(t), t)$ enthalten.

Folglich wird sich die Iterationsanzahl N für inelastische Übergänge erheblich höher als im elastischen Fall ergeben. Konkret wurden $N \geq 10$ Iterationen benötigt.

7.2. Über die numerischen Ergebnisse

In diesem Abschnitt präsentieren wir einige Resultate für die exklusiven Übergangswahrscheinlichkeiten der elastischen ($0 \rightarrow 0$, $1 \rightarrow 1$, $2 \rightarrow 2$, $3 \rightarrow 3$) bzw. inelastischen ($0 \rightarrow 1$, $0 \rightarrow 2$, $0 \rightarrow 3$, $1 \rightarrow 2$, usw.) Stöße im Rahmen des in den vorigen Abschnitten beschriebenen Modells.

Wir geben hier eine umfassende Studie der Abhängigkeiten von den verschiedenen Parametern dieses einfach und exakt (für die Matrixelemente) lösbaren Modells.

Für die Rechnungen wurden folgende Modellparameter verwendet:

Masse des Projektils: $M = 938.28 \text{ MeV}/c^2$

Masse des Targets $m = AM \gg M$

Reduzierte Masse der Relativbewegung $\mu = \frac{m h}{m + h} \approx h$

Maximum des Wechselwirkungspotentials: $U_0 = 2.22 \text{ MeV}$

Reichweite des Potentials: $\lambda = 0.1 \text{ fm}^{-1}$

Oszillatorenergiequantum: $\hbar\omega = 4.44 \text{ MeV}$

Einschußenergie des Projektils: $E = 18.55 \text{ MeV}$

Zuerst diskutieren wir die Tabelle.

7.2.1. Diskussion der Tabelle

Die Größen $P_{\alpha\alpha}^{(0)}$ bezeichnen die Übergangswahrscheinlichkeiten des Vibrators infolge der Wechselwirkung zwischen dem Target und Projektil aber ohne Rückwirkung auf die Relativbewegung. Die Zahlen $P_{\alpha\alpha}^{(1)} [\pm 1/2]$ bedeuten die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten mit Rückwirkung

auf die Bahnbewegung des Projektils.

Die Relativänderungen $\Delta P_{nn} / P_{nn}^{(0)} = (P_{nn}^{(1)} - P_{nn}^{(0)}) / P_{nn}^{(0)}$ sind prozentweise in der letzten Spalte angegeben. Im gegebenen Beispiel nehmen diese Verhältniszahlen alle Werte zwischen 0 % und nahezu 100 % an.

Im Rahmen der Konvergenzgenauigkeit sind dies exakte Lösungen. Diese Größen sind das Beste, was man in der zeitabhängigen semiklassischen Theorie erreichen kann.

Aus der Tabelle können wir die folgenden Feststellungen ablesen:

(0) Die vorgestellten Daten der Tabelle stammen aus quantenmechanischem Bereich.

(1) Für jedes elastische Ereignis finden wir den Zusammenhang

$$P_{nn}^{(1)} \lesssim P_{nn}^{(0)},$$

die Wahrscheinlichkeit wird also reduziert.

(2) Der Einfluß der Selbstkonsistenz wird umso größer, je näher die kinetische Energie $E = 1/2 v^2$ des Projektils an der Energieschwelle des Target-Vibrators liegt: $E_{kn} \approx n\hbar\omega$. Diesen typischen quantenmechanischen Effekt kann man also durch unsere selbstkonsistente semiklassische Methode in Berechnung nehmen.

(3) Für die Anregungen $n \rightarrow m$ ($n < m$) ergeben sich die Übergangswahrscheinlichkeiten mit Selbstkonsistenz kleiner als ohne Selbstkonsistenz. (Die Änderung ist negativ.)

Es gibt eine einzige Ausnahme: das Ereignis $2 \rightarrow 3$; wobei $P_{3,2}^{(0)} = 0.3340$, $P_{3,2}^{(1)} = 0.3391$ und die Änderung + 1.5 % ist.

(4) Für die Übergänge $n \rightarrow m$ ($n \geq m$, $n = 0, 1, 2, 3$) gilt die umgekehrte Relation, nämlich $P_{nn}^{(1)} > P_{nn}^{(0)}$; dabei bezeichnen $P_{nn}^{(1)}$ bzw. $P_{nn}^{(0)}$ die entsprechende Übergangswahrscheinlichkeiten mit bzw. ohne Selbstkon-

sistenz.

(Die Änderung ist positiv.)

Hier findet man auch eine Ausnahme, und zwar das Ereignis: 3→2; wobei $P_{12}^{(0)} = 0.3340$ ($P_{12}^{(0)} = P_{21}^{(0)}$), $P_{12}^{(1)} = 0.3269$ und die Änderung: - 2.1 % ist.

Die Ereignisse (1) - (4) lassen sich durch die Geschwindigkeitsänderungen erklären.

Ohne Rückwirkung der Vibratorübergänge auf die Bahnbewegung ist die Relativgeschwindigkeit im Wechselwirkungsbereich konstant.

Durch die Kopplung wird aber die Projektilgeschwindigkeit kleiner oder größer sein je nach dem, ob das Übergangsereignis An- oder Abregung ist.

Bei Anregung (und auch elastischer Streuung) wird das Teilchen aus seiner Geschwindigkeit - gemäß der Anregung - einen kleineren oder größeren Teil verlieren. Die kleinere Geschwindigkeit bedeutet aber kleinere Übergangswahrscheinlichkeit - und umgekehrt.

7.2.2. Diskussion über die Bilder

Die Figuren 1 - 4 zeigen, wie sich die selbstkonsistenten Anregungsprozesse abspielen. In Figur 2 sieht man:

- a) Das dynamische Potential ohne Selbstkonsistenz (durchgezogene Linie) berechnet mit konstanter Geschwindigkeit;
- b) das selbstkonsistente Potential $V_{w0}(\vec{r}(t))$ (gebogene Linie). Die Potentialänderung für das Beispiel ist mit etwa 40 % ganz erheblich.

Figur 1 zeigt die selbstkonsistenten Potentiale für die

Ereignisse $0 \rightarrow 1$ und $0 \rightarrow 3$.

Der Kraft: $-\text{grad}(V_{mn}(\vec{r}(t)))$ ($m \geq n: 0, 1, 2, 3$) bremst das Projektil, folglich wird die durch das abgebremste Teilchen induzierte Anregungswahrscheinlichkeit beträchtlich kleiner sein. Solche typischen selbstkonsistenten Geschwindigkeiten für die Ereignisse $0 \rightarrow 1$ und $0 \rightarrow 3$ findet man in Figur 3, während in Figur 4 die durch die Selbstkonsistenz verursachte Geschwindigkeitsänderung zu sehen ist. Für das gewählte Beispiel macht sie etwa - 22 % aus.

Figur 5 zeigt deutlich, wie stark ein solcher Übergang ($0 \rightarrow 3$) die Relativbewegung beeinflussen kann: wegen der verkleinerten Relativgeschwindigkeit deformiert sich die Trajektorie im Wechselwirkungsbereich ganz beträchtlich.

Es zeigt sich, daß die Übergangswahrscheinlichkeiten P_{m0}^{Qu} sehr klein sind, wenn $E_{m1}^i \gg \hbar\omega$ ist, und zwar so, daß der Zusammenhang mit der semiklassischen Übergangswahrscheinlichkeit: $P_{m0}^{Qu} \approx P_{m0}^{SU}$ gilt.

Ein erheblicher Unterschied zwischen P_{m0}^{Qu} und P_{m0}^{SU} ergibt sich nahe der Energieschwelle $E_{m1}^i \approx \Delta E_{Vilr}$ d. h.:

$$|P_{m0}^{Qu} - P_{m0}^{SU}| > 0 \quad \text{wenn} \quad E_{m1}^i \approx \Delta E_{Vilr} = \hbar\omega.$$

* * *

Bemerkung: wir haben die Größe: $P_{m0}^{Qu} = P_{m0}[\vec{r}(t)] = P_{m0}^{(U)}$ mit unterbrochenen Linien und: $P_{m0}^{SU} = P_{m0}(\vec{r}^{(0)}(t))$ mit durchgezogenen Linien bezeichnet.

* * *

* * *

Der vorliegende Fall ist etwas komplexer, man muß noch einen weiteren Parameter U_0 (die Stärke des Potentials)

neben der kinetischen Energie (o. Anfangsrelativenergie wegen $\mu \approx h$) $E_{rel}^i = \frac{1}{2} \mu v_i^2$ infolge der Kopplung $\hat{H}_{1,2}$ zwischen den Untersystemen (d. h.: Target ($\hat{H}_2$) + Projektil ($\hat{H}_1$)) einführen. Gleich erhebt sich die Frage: was kann man über das Verhältnis zwischen $P_{n,0}^{Qu}$ und $P_{n,0}^{SU}$ durch die Parameter E_{rel} und U_0 (oder V_0 auch) sagen?

Aus unseren Untersuchungen läßt sich diese Frage beantworten. In den Figuren 6, 7 und 8 ist die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{m,0}$ für Anregungen aus dem Grundzustand als Funktion des Parameters E , $\hbar\omega$ und U_0 dargestellt, aus diesen Figuren können wir ablesen, daß die folgenden Feststellungen gültig sind:

$$(1) \quad P_{m,0}^{Qu} \geq P_{m,0}^{SU}, \quad \text{wenn} \quad E_{rel}^i \gg \Delta E_{Vib.} \quad \text{und} \quad E_{rel}^i \gg U_0.$$

Im besonderen Fall der schwachen Kopplung ($U_0 \rightarrow 0$ d. h. $U_0 \approx 0$) findet man das Resultat: $P_{m,0}^{Qu} \approx P_{m,0}^{SU} \approx 0$, wenn $E_{rel}^i \gg E_{Vib.}$ (und zwar gilt auch $E_{rel}^i \gg U_0 \approx 0$).

Dabei sind: U_0 (oder V_0) die Stärke des Kopplungspotentials, E^i die Relativenergie nach der Wechselwirkung: $E^i = \frac{1}{2} \mu v_i^2$; $\Delta E_{Vib.}$ die Energieschwelle für den Übergang $n \rightarrow m$ des Vibrators: $\Delta E_{Vib.} = (m-n)\hbar\omega$.

$$(2) \quad P_{m,0}^{Qu} < (<) P_{m,0}^{SU}, \quad \text{wenn} \quad E_{rel}^i \approx \Delta E_{(m)}^{Vib.} \quad \text{und} \quad E_{rel}^i \geq U_0.$$

Fälle, die der Aussage 1 entsprechen, findet man in Figur 6 bzw. Figur 7, und zwar der asymptotische Bereich ab etwa $E_{rel}^i = 50 \text{ KeV}$ in Figur 6, bzw. des Bereichs: $0 \leq \hbar\omega \leq 3 \text{ KeV}$ in Figur 7.

Die Aussage 2 unterstützen die Bilder 6 bzw. 7 durch die Bereiche: $0 < E_{rel}^i \leq 50 \text{ KeV}$ bzw. $3 \leq \hbar\omega \leq 9 \text{ KeV}$.

Figur 6 zeigt offenbar, daß der Unterschied: $P_{m,0}^{Qu} - P_{m,0}^{SU}$ immer beträchtlicher wird, wenn sich die Anfangsrelativenergie der jeweiligen Vibrationsenergieschwelle nähert.

Der asymptotische Bereich der Kurven beweist, daß $P_{m,0}^{Qu} \geq$

$\geq P_{m0}^{sl}$ gilt, wenn $E_{rel}^i \rightarrow \infty$ (semiklassischer - oder sogar klassischer Bereich).

Figur 7 zeigt das Verhalten der Übergangswahrscheinlichkeiten bei wachsendem Oszillatorquantum $\hbar\omega$. Im Fall $0 \leq \hbar\omega \ll E_{rel}^i$ sind die Wahrscheinlichkeiten P_{m0}^{qu} und P_{m0}^{sl} nahezu identisch miteinander: $P_{m0}^{qu} \approx P_{m0}^{sl}$ (semiklassischer Bereich). Wenn $m\hbar\omega \approx E_{rel}^i$ ist, zeigt sich die Existenz der Schwelle und zwar als sinkende Übergangswahrscheinlichkeit infolge der Geschwindigkeitsverkleinerung, also $P_{m0}^{qu} < (<) P_{m0}^{sl}$ (Quantenmechanischer Bereich).

Figur 8 zeigt die Wahrscheinlichkeiten P_{m0}^{qu} und P_{m0}^{sl} als Funktion der Stärke des Kopplungspotentials.

Vor der Maxime der Kurven sieht man, daß sich die quantenmechanischen Wahrscheinlichkeiten ohne Selbstkonsistenz ergeben. Jenseits der Maximalwerte gilt aber $P_{m0}^{qu}(>) > P_{m0}^{sl}$.

Folglich ist die Aussage 3:

(3) $P_{m0}^{qu}(>) > P_{m0}^{sl}$, wenn $E_{rel}^i \geq E_{(m)}^{vib}$ und $E_{rel}^f < U_0$.

Man muß also den durch die Relationen

$$\frac{1}{2} \mu v_i^2 \gg m \hbar \omega, \quad \frac{1}{2} \mu v_f^2 < U_0$$

bestimmten Bereich quantenmechanisch behandeln.

* * *

Bemerkung: Die asymptotische Form der semiklassischen Übergangswahrscheinlichkeit P_{m0}^{sl} lautet (s.: Abschnitt 5.3.3.)

$$P_{m0} = \frac{|L_0|^{2m} e^{-|L_0|^2}}{m!}, \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

dabei gilt für die benutzte Wechselwirkung

$$L_0 = -U_0 a(E) (\cosh(E_0 a(E)))^{-1},$$

ferner

$$a^2(E) = \frac{1}{V^2} \left(\frac{V}{\lambda k} \right)^2 = \frac{\mu}{2E} \left(\frac{V}{\lambda k} \right)^2 \quad \text{und} \quad E_0 = \frac{k\omega}{2} ,$$

wobei die Relativenergie im Wechselwirkungsbereich $E = \frac{1}{2} \mu v^2$ ist. Folglich ergibt sich P_{m0} als Funktion von U_0 :

$$P_{m0} = A_m (U_0^2)^m e^{-A_1 (U_0^2)}$$

mit

$$A_0 \equiv 1; \quad A_1 \equiv \left(a(E) (\cosh(E_0 a(E)))^{-1} \right)^2; \quad A_m = (m!)^{-1} A_1^m. \\ (m = 0, 1, 2, \dots)$$

Im selbstkonsistenten Fall erwarten wir die gleiche Form für P_{m0}^{qu} , nämlich:

$$P_{m0}^{qu} = \tilde{A}_m ((U_0 - \tilde{U}_m)^2)^m e^{-\tilde{A}_1 (U_0 - \tilde{U}_m)^2}$$

wobei $\tilde{U}_m = \tilde{U}(m)$ eine monotone Funktion in m mit $\tilde{U}(m=0) = 0$ ist. (Siehe noch Formel (6.31)!))

* * *

Man kann feststellen, daß neben der Energieschwelle des Vibrators $E_{red}^i \approx \Delta E_m^{vib}$ auch die Gestalt des Wechselwirkungspotentials und seine Stärke U_0 eine wichtige Rolle spielt.

8. Anhang

Über die Methode der stationären Phasen

Nehmen wir (Mar.80), (Mors.53) an, daß unser zu errechnendes (uneigentliches) Integral die folgende Form hat:

$$I(\lambda) \equiv \int_C A(\vec{q}) e^{i\lambda S(\vec{q})} d\vec{q} \quad (\text{A.1})$$

Seien die (reellen) Funktionen $A(\vec{q})$ bzw. $S(\vec{q})$ im N -dimensionalen Raum stetig bzw. zweimal stetig differenzierbar, ferner sei $\vec{q}_0$ ein stationärer Punkt der Funktion $S(\vec{q})$

$$\left. \frac{d}{d\vec{q}} S(\vec{q}) \right|_{\vec{q}_0} = 0, \quad (\text{A.2})$$

und λ ein großer Parameter. Dann folgt, nach Laplace, daß man eine Approximation für das Integral (A.1) in folgender Form

$$I(\lambda) \equiv \int A(\vec{q}) e^{i\lambda S(\vec{q})} d\vec{q} = (2\pi\lambda^{-1})^{\frac{N}{2}} |\det D|^{-\frac{1}{2}} A(\vec{q}_0) e^{i\lambda S(\vec{q}_0) + iM(\frac{\pi}{2})} + O(\lambda^{-1}) \quad (\text{A.3})$$

erhalten kann, wobei der Parameter M als die Differenz der Anzahl von positiven und negativen Eigenwerten der Matrix

$$D \equiv \left(\frac{\partial^2 S(\vec{q})}{\partial q_i \partial q_i} \right) \Big|_{\vec{q}_0} \quad (\text{A.4})$$

definiert ist. (Manche bezeichnen M als Index der Matrix D .)

Die Funktion $S(\vec{q})$ läßt sich in Umgebung ihres stationären Punktes $\vec{q}_0$ durch eine Taylor-Reihe darstellen

$$S(\vec{q}) = S(\vec{q}_0) + (2!)^{-1} \lambda D^{ii}(\vec{q}_0) \Delta q_i \Delta q_i + \dots \quad (\text{A.5})$$

mit $\Delta \vec{q} = \vec{q} - \vec{q}_0$. Wenn wir die höheren Terme dieser Reihe vernachlässigen wollen, erhalten wir mit Hilfe des Gaußschen-Integrals

$$I(a, b) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a u^2 + b u} du = \left(\frac{\pi}{a}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{b^2}{4a}} \quad (\text{A.6})$$

den Ausdruck (A.3) als die erste Näherung des Integrals (A.4).

* * *

Bemerkungen:

1.) Gewöhnlich wählt man im klassischen Grenzfall der Quantenmechanik für λ als großen Parameter im Integral natürlicherweise:

$$\lambda = \hbar^{-1}.$$

2. Der Typ des Integrals (A.4) steht im engen Zusammenhang mit dem Laplace -bzw. Fourier-Integral. Die Fourier-Transformierte einer oszillierenden Funktion gibt gerade eines der wichtigsten Beispiele für das Integral (A.4): nämlich, wenn die Funktion $\Psi(\vec{q})$ in der Form

$$\Psi(\vec{q}) = A(\vec{q}) e^{\frac{i}{\hbar} S_0(\vec{q})}$$

(mit der Wahl $A(\vec{q}) \equiv |\Psi(\vec{q})|$ und $\hbar S_0(\vec{q}) \equiv \text{Arg } \Psi(\vec{q})$) gegeben ist, dann gilt:

$$\varphi(\vec{p}) = (2\pi\hbar)^{-\frac{N}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} A(\vec{q}) e^{\frac{i}{\hbar} (S_0(\vec{q}) - \vec{p}\vec{q})} d\vec{q},$$

wobei man die Funktion im Exponent als

$$S(\vec{q}) = S_0(\vec{q}) - \vec{p}\vec{q}$$

ansehen kann, und zwar ergibt sich die Größe $\vec{p} = \hbar^{-1} \vec{p} = \vec{p}\lambda$ als das Argument der Fourier-Transformierten der Funktion: $A(\vec{q}) e^{i\lambda S_0(\vec{q})} = \Psi(\vec{q})$. Der stationäre Punkt von $S(\vec{q})$ ist

$\vec{p}$ -abhängig. Er ist definiert durch die Gleichung

$$\left. \frac{\partial S(\vec{q})}{\partial \vec{q}} \right|_{\vec{q}_0} = 0,$$

das heißt

$$\vec{p} = \left. \frac{\partial S_0(\vec{q})}{\partial \vec{q}} \right|_{\vec{q}_0}.$$

Im Exponent erscheint die sogenannte Legendre transformierte S der Funktion $S_0(\vec{q})$. Der Zusammenhang ist also

$$S(\vec{p}) = - S(\vec{q}_0) = - (S_0(\vec{q}_0) - \vec{p} \cdot \vec{q}_0).$$

(Diese Transformation findet Anwendung speziell in der Mechanik beim Übergang von der Lagrange-Funktion $L(q, \dot{q}, t)$ zur Hamilton-Funktion $H(p, q, t)$.)

3.) Das Ergebnis (A.3) ist nicht anwendbar, wenn $\det D = 0$. In diesem Fall hat die Funktion $S(\vec{q})$ ein Extremum von höherer Ordnung, deshalb muß man in der Reiheentwicklung (A.5) noch weitere Terme berücksichtigen. (Dieses Problem steht in Analogie zu der asymptotischen Berechnung der mehrdimensionalen Airy-Funktion.)

4.) Wenn die Gleichung (A.2) mehr als eine Lösung (z.B. $\vec{q}_0^1, \vec{q}_0^2, \dots, \vec{q}_0^r$) hat, muß man jeden Beitrag $I(\lambda, \vec{q}_0^k)$ der einzelnen Extremal-Punkte $\vec{q}_0^k$ ($k=1, 2, \dots, r$) beachten und addieren. Das Resultat für $I(\lambda)$ ergibt sich in folgender Form:

$$I(\lambda) = \sum_{k=1}^r I(\lambda, \vec{q}_0^k) = \sum_{k=1}^r (2\pi\lambda^{-1})^{\frac{N}{2}} |\det D(\vec{q}_0^k)|^{-\frac{1}{2}} e^{i\lambda S_0(\vec{q}_0^k) + i\hbar \Delta_k \frac{1}{\lambda}} + O(\lambda^{-1}).$$

Im Fall einer quadratischen Funktion $S(\vec{q})$ kann die Gleichung (A.2) nicht mehr als eine Wurzel haben.

5.) Wenn $I(\lambda)$ ein explizit parameter-abhängiges Integral ist, welches wir z. B. in Anmerkung (2) vorgestellt haben, so ist dieser Fall nach den Anmerkungen (3) und (4) von besonderem Interesse. Im konkreten Fall des Fourier-Integrals wird die Gleichung:

$$\det D(\vec{q}_0^k) = 0 \quad , \quad k = 1, 2, \dots, r$$

eine singuläre Fläche im Impulsraum determinieren. Eine Überschreitung von solchen Flächen kann den Index M_1 der Matrix $D(\vec{q}_0^k)$ verändern, und zwar kann sich der Phasenbeitrag des entsprechenden Extrempunktes ändern. Der Fall: $\det D(\vec{q}_0) = 0$ - wobei $\vec{q}_0$ ein N-dimensionale Vektor ist - ist bekannt als Brennflächenphänomen ("caustics") (Be.72) und (Schu.81). Dieses Phänomen findet Anwendung u. a.:

- (1) in der Elektronenoptik (Schu.81),
- (2) in der sogenannten Katastrophentheorie (Be.76).

* * *

* * *

9. Tabelle- und Figurenbeschreibung

Tafel: Tabelliert sind die Übergangswahrscheinlichkeiten P_{mn} zwischen den Oszillatorzuständen: 0, 1, 2, 3, berechnet ohne, $P_{mn}^{(0)}[\tau(t)]$, bzw. mit $P_{mn}^{(1)}[\tilde{\tau}(t)]$, Rückwirkung der Kernübergänge auf die Trajektorie der Relativbewegung $\tau(t)$ bzw. $\tilde{\tau}(t)$.

Figur 1: Das selbst-konsistente Potential $V_{m0}(\tilde{\tau}(t))$ als eine Funktion der Zeit für die Anregungen $0 \rightarrow 1$ und $0 \rightarrow 3$. Die Potentiale zeigen einen Übergang mit Abweichungen von den stationären Anfangs: 0 bzw. Endzuständen: u_{th} des Targetkernes. Das selbstkonsistente Potential $V_{30}(\tilde{\tau}(t))$ ergab sich durch die Lösung der klassischen dynamischen Gleichung der Relativbewegung $\tilde{\tau}(t)$.

Figur 2: Analog zu Figur 1. Die durchgezogene Linie zeigt die Energieoberfläche $V_{30}(\tau^{(0)}(t))$ entlang der kopplungsfreien Trajektorie $\tau^{(0)}(t)$, während das mit der gepunkteten Linie dargestellte Potential $V_{30}(\tau^{(1)}(t))$ durch die erste Approximation der selbstkonsistenten Trajektorie $\tilde{\tau}(t)$ berechnet worden ist.

Figur 3: Dargestellt sind zwei selbstkonsistente Geschwindigkeiten in dem Wechselwirkungsbereich wie $\bar{V}_{10}(t)$ und $\bar{V}_{30}(t)$ für die Übergänge $0 \rightarrow 1$ und $0 \rightarrow 3$, die durch das entsprechende selbstkonsistente Potential $V_{10}(\tilde{\tau}(t))$ bzw. $V_{30}(\tilde{\tau}(t))$ berechnet wurden.

Figur 4: Die Abbildung zeigt als Illustration für die Konvergenz des Iterationsverfahrens die Abhängigkeit der Geschwindigkeit $\dot{\tau}^{(i)}(t)$ von der Zahl der Iterationsschritte. Die Iterationsanzahl, die erforderlich war um das Kriterium

der Selbstkonsistenz zu erreichen, ist $i_{max} = 1 - \epsilon$ (Unterbrochene Linie: $\dot{r}(t)$). Das Endresultat wird meist schon mit dem ersten, zweiten Iterationsschritt d. h. $i = 1, 2$ (durchgezogene Linie: $\dot{r}^{(1)}(t)$, bzw. gepunktete Linie: $\dot{r}^{(2)}(t)$) gut angenähert. Die nullte Geschwindigkeitsapproximation ist die Wahl $\dot{r}^{(0)}(t) = v = \text{Konstante}$, dies entspricht der Betrachtung ohne Rückwirkung auf die Bahnbewegung.

Figur 5: Das Bild zeigt die selbstkonsistente Trajektorie $\bar{r}(t)$ (unterbrochene Linie) für das Anregungsereignis $0 \rightarrow 3$ im Vergleich zu der rückwirkungsfreien Bahn $r^{(0)}(t) = V_0 |t|$ (durchgezogene Linie), wobei $V_0 = 0.2 c = \text{Konstante}$ ist. Man bemerkt einen beträchtlichen Unterschied zwischen den Trajektorien $r^{(0)}(t)$ und $\bar{r}(t)$.

Figur 6: Für elastische $0 \rightarrow 0$ und inelastische $0 \rightarrow m$ ($m = 1, 2, 3$) Streuereignisse ist die Relativenergieabhängigkeit E der Übergangswahrscheinlichkeiten $P_{m0}(r(t); E)$ (durchgezogene Linie) bzw. $P_{m0}(\bar{r}(t); E)$ (unterbrochene Linie) ohne bzw. mit Berücksichtigung der Rückwirkung der Quantenübergänge der Fragmente auf die klassische Trajektorie der Relativbewegung dargestellt. E_1, E_2, E_3 sind die Schwellenenergien der sich neu eröffnenden Anregungskanäle des Targetkerns. E bezeichnet die kinetische Anfangsenergie.

Figur 7: Analog zu Figur 6. Die Abbildung zeigt die Übergangswahrscheinlichkeiten $P_{m0}(r(t); \Delta E_\omega)$ bzw. $P_{m0}(\bar{r}(t); \Delta E_\omega)$ als Funktion des Vibrationsenergiequantums des Targetkerns $\Delta E_\omega = \hbar \omega$, wobei die Größen P_{m0} entlang der rückwirkungsfreien $r(t)$ (durchgezogene Linie) bzw. selbstkonsistenten $\bar{r}(t)$ (unterbrochene Linie) Trajektorie

berechnet worden sind. $\bar{E}_3$, $\bar{E}_2$, $\bar{E}_1$ sind die Schwellenenergien für eine gegebene kinetische Anfangsenergie.

Figur 8: Analog zu den Figuren 6 und 7. Die dargestellten Übergangswahrscheinlichkeiten P_{mo} als Funktion der Wechselwirkungsstärke U_0 sind ohne $P_{mo}(r(t); U_0)$ (durchgezogene Linie) bzw. mit $P_{mo}(\bar{r}(t); U_0)$ (unterbrochene Linie) Rückwirkung der Übergänge des Vibrators auf die Trajektorie der Relativbewegung berechnet worden.

Figur 9: Die Anregungswahrscheinlichkeiten, berechnet mit ungestörten (durchgezogene Linie) und selbstkonsistenten (unterbrochene Linie) Trajektorien als Funktion des Stoßparameters b für die Anregung $0 \rightarrow 3$ des Vibratorkerns.

Tabelle

States		Transition probabilities		$\Delta P_{m,n} = 100 \cdot$
Final	Initial	without self-consistence	with	$\frac{p_{m,n}^{(2)} - p_{m,n}^{(1)}}{p_{m,n}^{(1)}}$
m	n	$p_{m,n}^{(1)}$	$p_{m,n}^{(2)}$	$\Delta P_{m,n} [\%]$
0	0	.7068	.7063	- 0.0
0	1	.2439	.1554	4.7
0	2	.0420	.0505	20.2
0	3	.0048	.0070	45.8
1	0	.2439	.2309	- 5.3
1	1	.3050	.3005	- 1.4
1	2	.3344	.3344	0.0
1	3	.0987	.1154	16.9
2	0	.0420	.0281	- 33.0
2	1	.3344	.3270	- 2.2
2	2	.0976	.0941	- 3.5
2	3	.3340	.3269	- 2.1
3	0	.0048	.0009	- 81.2
3	1	.0987	.0699	- 29.2
3	2	.3340	.3391	1.5
3	3	.0136	.0122	- 10.2
The values of other parameters: $E = 18.55 \text{ MeV}$ $U_0 = 2.12 \text{ MeV}$ $\hbar\omega = 4.44 \text{ MeV}$ $\lambda = 0.1 \text{ fm}^{-1}$ $b = 0 \text{ fm}$				

Figure 1

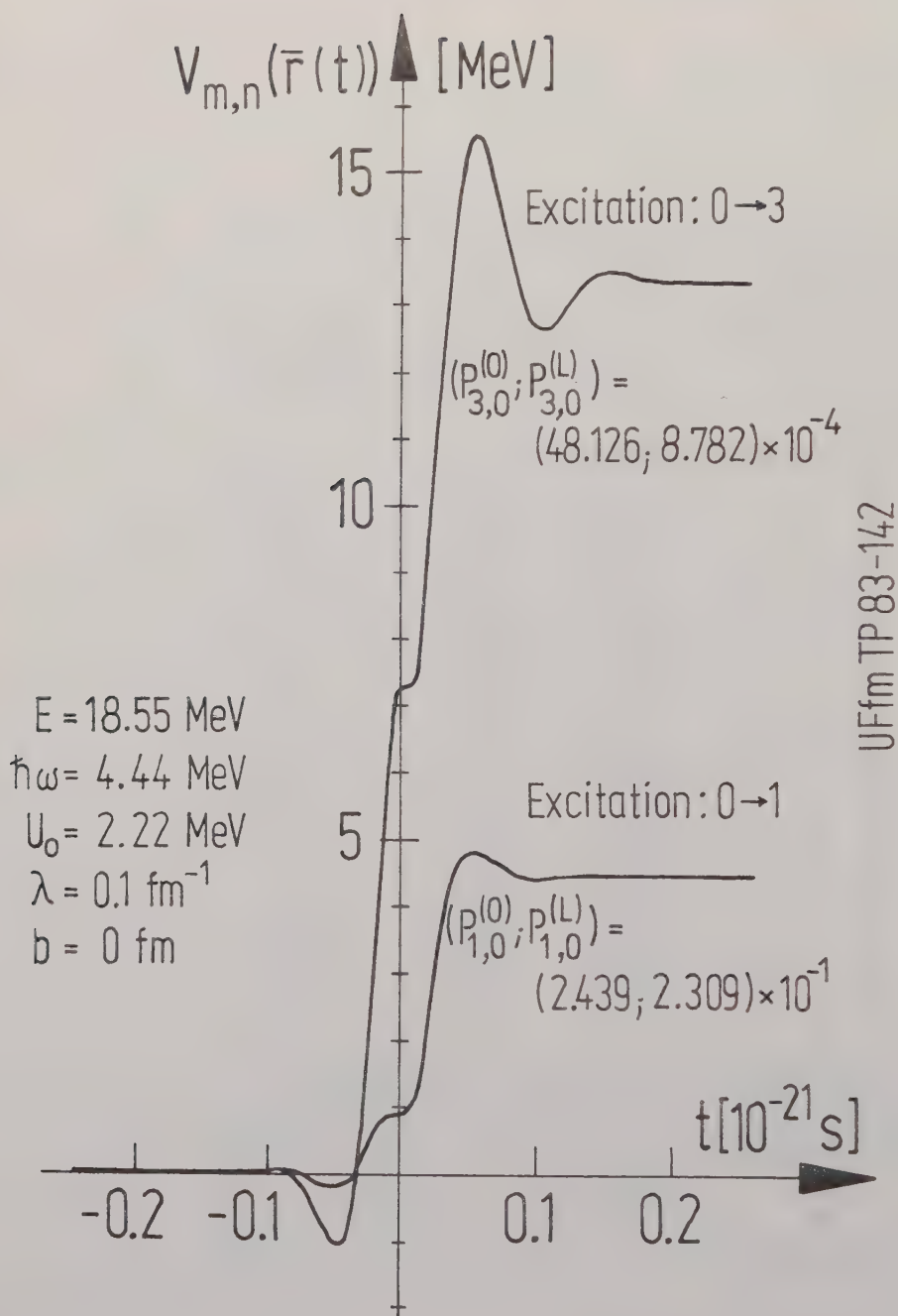


Figure 1

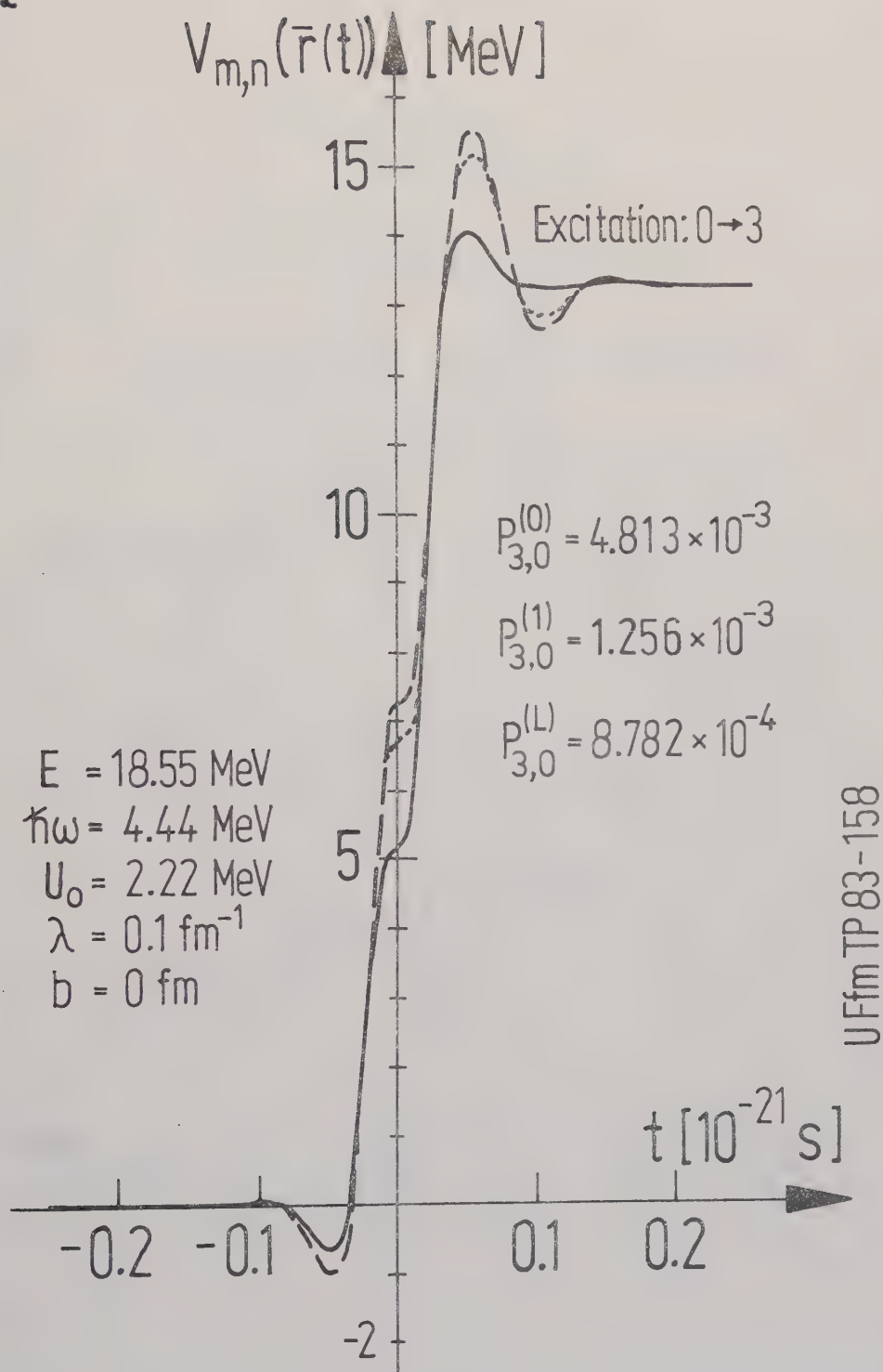


Figure 3

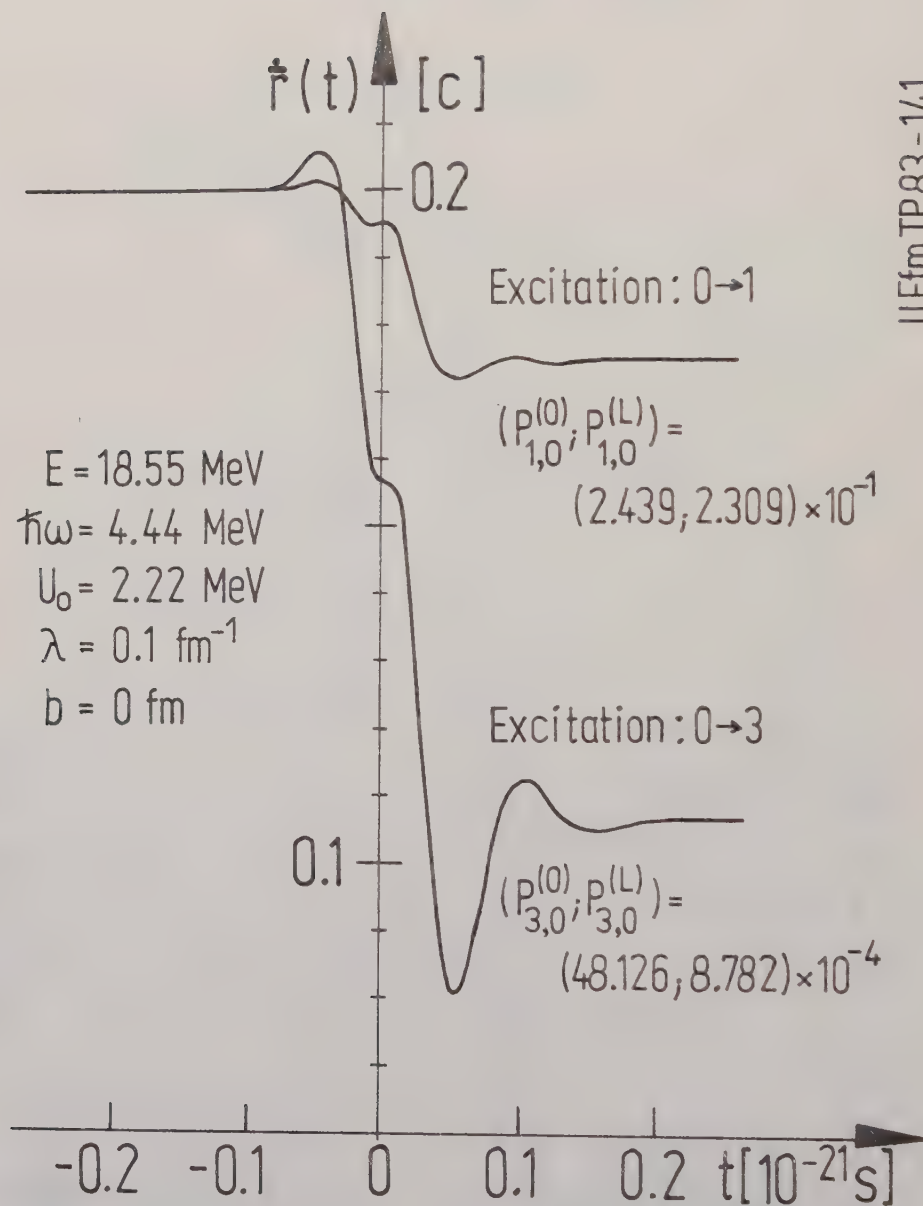


Figure 4

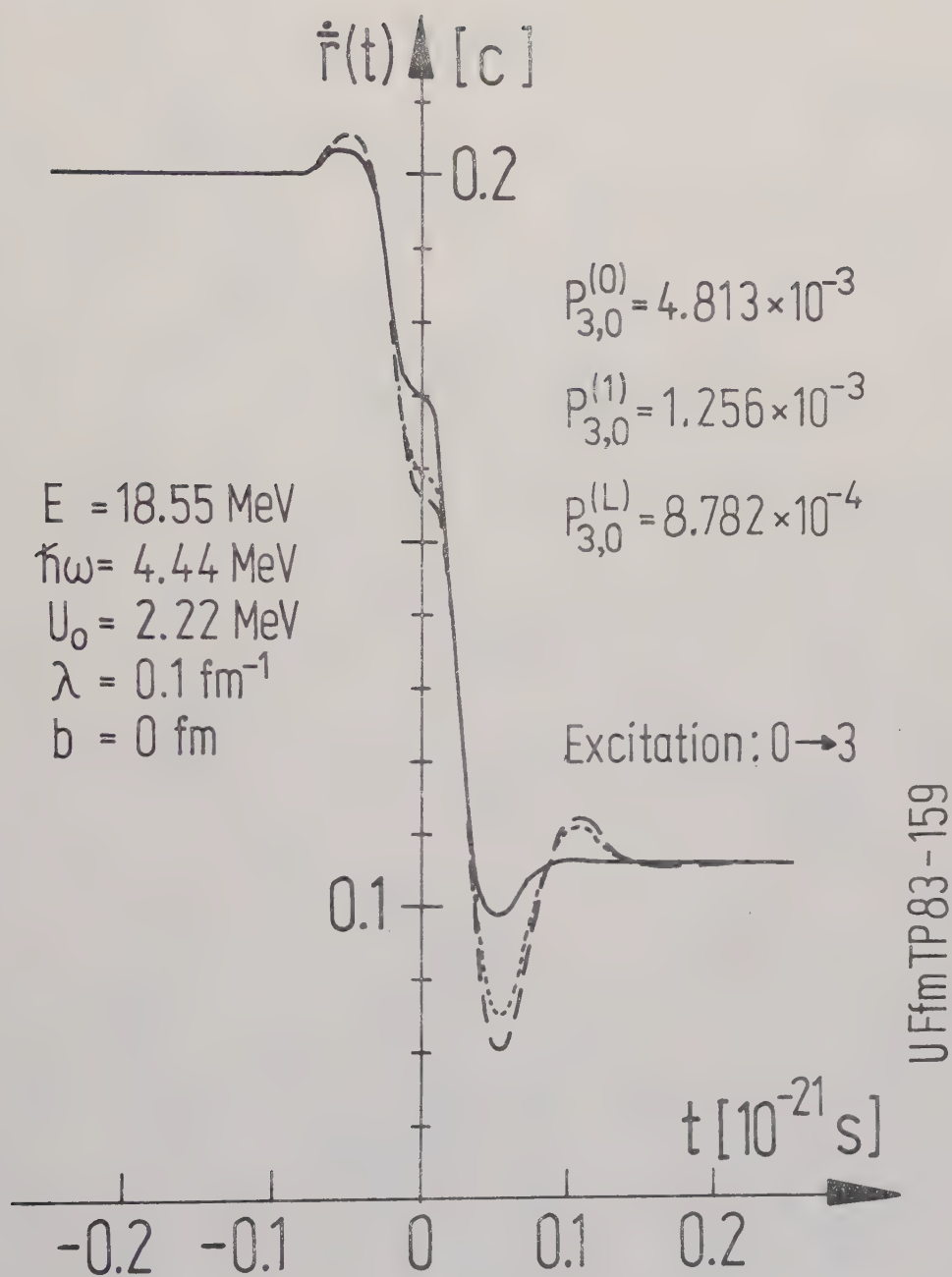
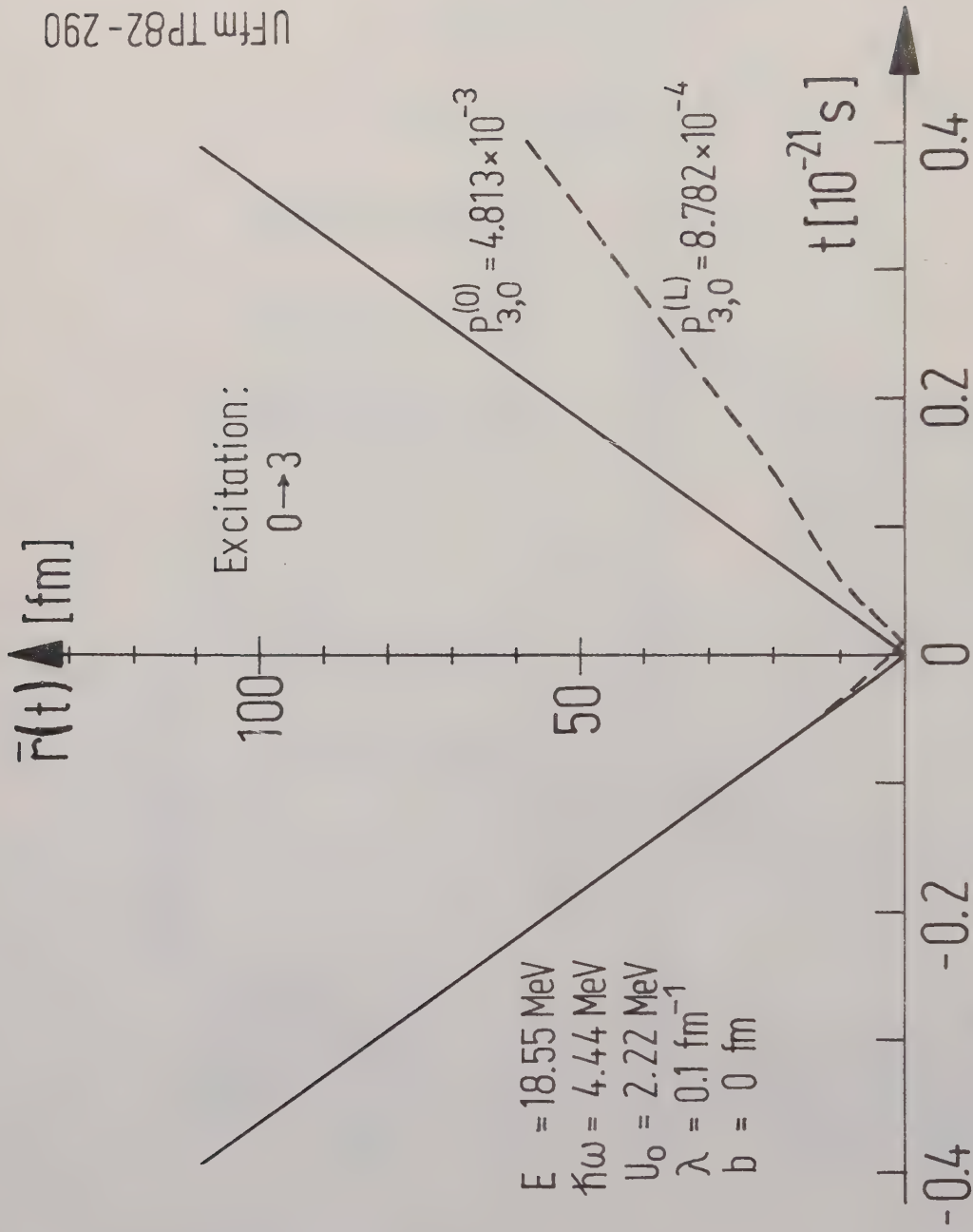


Figure 5



UFTm TP82-290

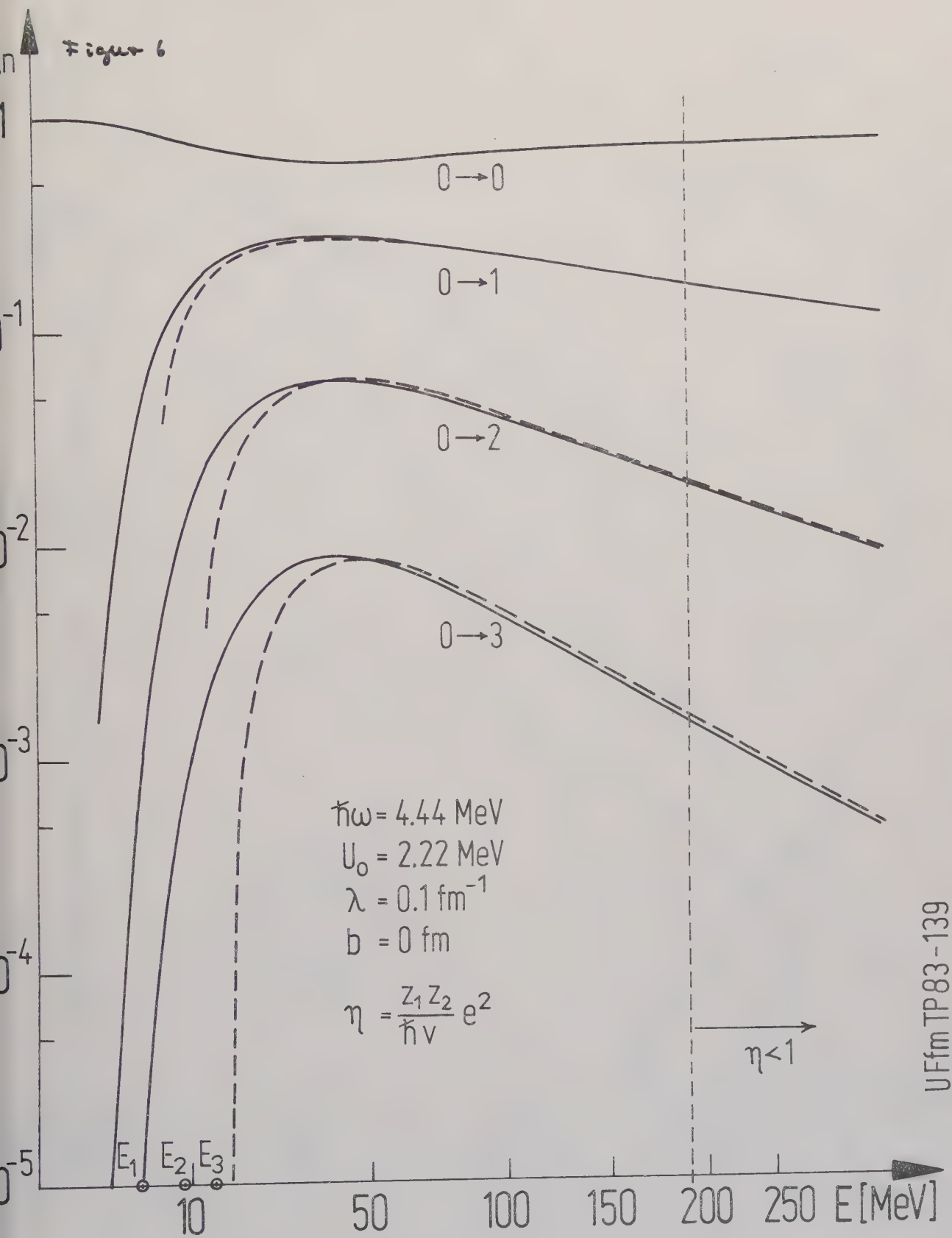
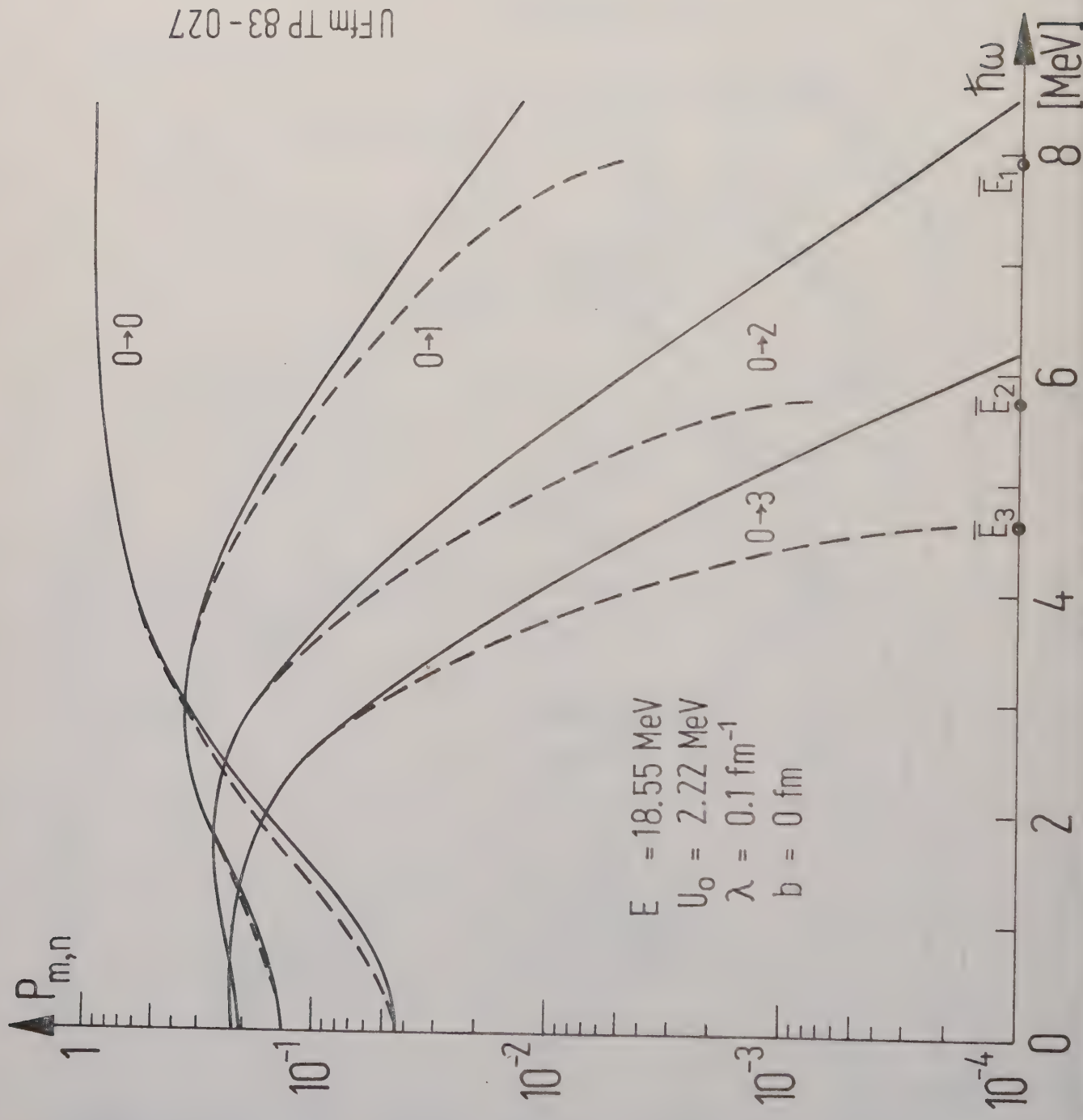


Figure 7

U Ffm TP 83-027



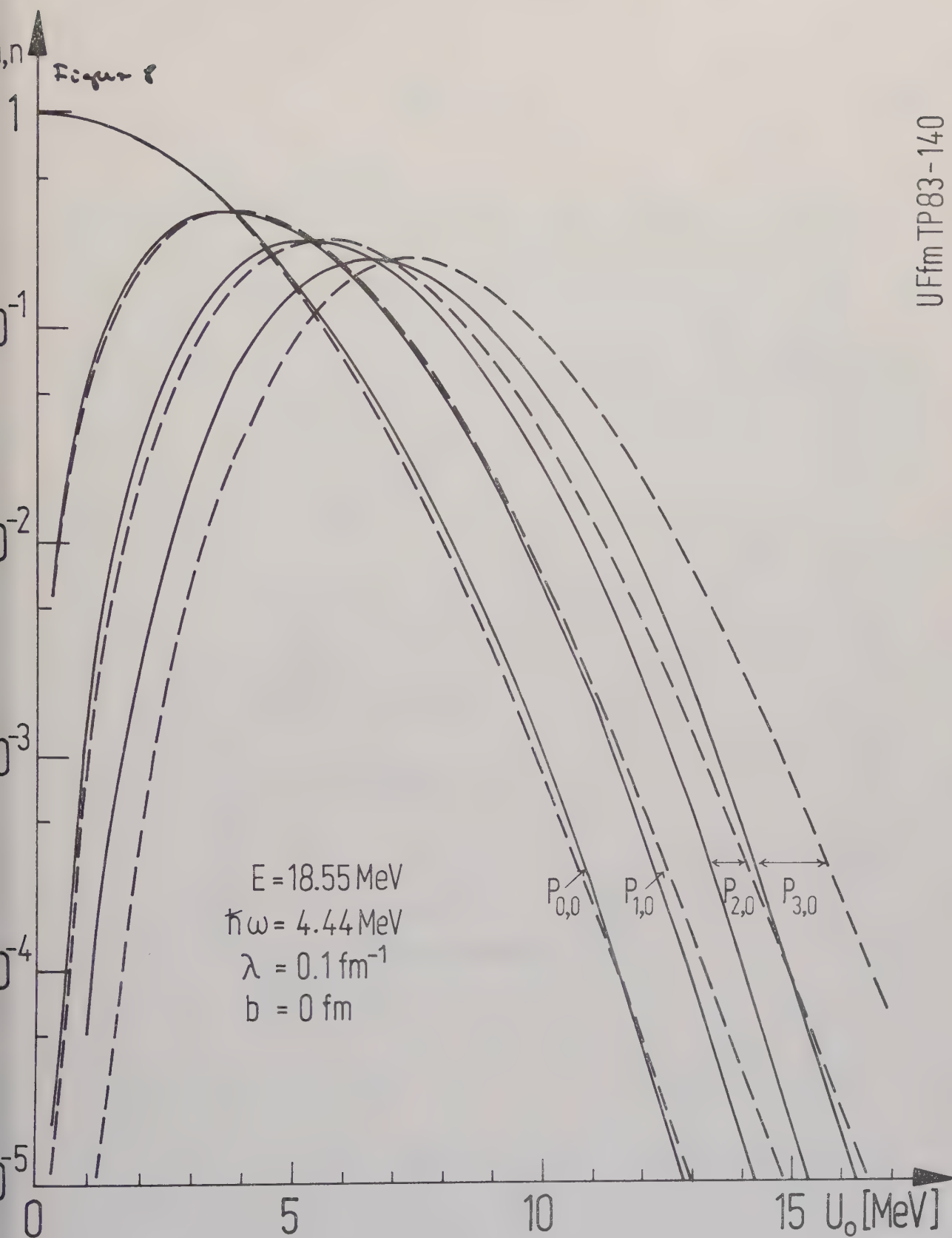
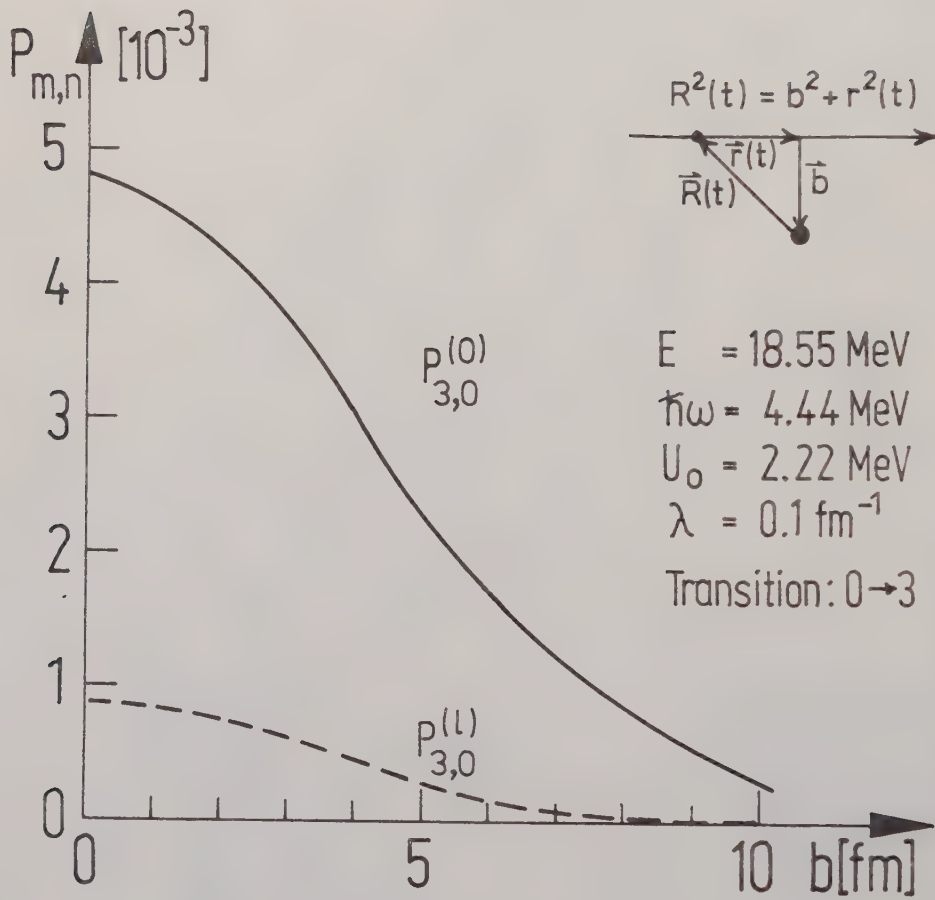


Figure 2



UFfm TP83-026

Lebenslauf

Am 9. März 1947 wurde ich als Sohn des Müllers Ferenc Krisztinkovics und dessen Ehefrau Irén Krisztinkovics, geb. Magyarossy in Bakonycsernye/Ungarn geboren. Von 1953 - 1961 ging ich in die allgemeinbildende polytechnische Oberschule in Bakonycsernye. Anschließend besuchte ich das "Táncsics-Mihály-Gymnasium" in Mór und erhielt das Zeugnis der Reife mit dem Ergebnis: "sehr gut".

Vom Wintersemester 1965/66 an studierte ich Physik und Mathematik an der "Kossuth-Lajos-Universität" in Debrecen Ungarn, bestand im Juni 1971 das Staatsexamen und die Diplomprüfung mit dem Ergebnis "sehr gut". Meine Diplomarbeit hatte den Titel: "Über die Erwartungswerte der quantenmechanischen Operatoren in Gamow-Zuständen". Vom August 1971 bis September 1972 war ich als wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Abteilung für Theoretische Physik des Kernforschungsinstitutes der Akademie der Wissenschaften in Debrecen unter Leitung von Frau Prof. Dr. B. Gyarmati tätig. Ich arbeitete dort auf dem Gebiet der niederenergetischen Kernphysik insbesondere über die zu Resonanzzuständen führenden Kernreaktionen und Endzustandwechselwirkungen.

Von Oktober 1972 bis Januar 1974 war ich Assistenzprofessor am Institut für Physik der Universität Gödöllő/Ungarn, wobei ich auf dem Gebiet der irreversiblen Thermodynamik unter Leitung von Prof. Dr. I. Gyarmati arbeitete.

Von Februar 1974 bis August 1980 war ich als Assistenzprofessor für Mathematik ebenfalls an der Universität Gödöllő tätig. Unter Leitung von Prof. Dr. M. Hosszú (sein Forschungsgebiet: Funktionalgleichungen) beschäftigte ich mich auf dem Gebiet Differentialgleichungen

und Randwertprobleme der mathematischen Physik und in Zusammenarbeit mit dem Prof. Dr. M. Farkas geleiteten Mathematischen Institut an der Technischen Universität Budapest auf dem Gebiet der nichtlinearen Schwingungen insbesondere periodischer Störungen autonomer Systeme. Seit Oktober 1980 bin ich als Doktorand bei Herrn Prof. Dr. W. Greiner am Institut für Theoretische Physik an der J.-W.-Goethe-Universität in Frankfurt am Main. Ich bin seit Oktober 1978 verheiratet mit Anna Krisztinkovics geb. Angyal, wir haben eine Tochter.

Meine akademischen Lehrer waren:

In Deutschland

Prof. Dr. W. Greiner, Prof. Dr. B. Müller, Dr. J. Reinhardt,
Prof. Dr. J. Maruhn, Prof. Dr. Th. Elze, Dr. U. Heinz,
Prof. Dr. J. Weidmann

in Ungarn die Herren Professoren:

Gy. Csanak, Gy. Csikai, R. Gáspár, I. Gyarmati,
G. Györgyi, I. Lovas, S. Szalay, J. Zimányi, J. Aczél,
Z. Daróczy, J. Erdős, M. Farkas, M. Hosszú, A. Kertész,
L. Losonczi und Frau Professor B. Gyarmati.

Danksagung

Meinem Doktorvater, Herrn Prof. Dr. Walter Greiner danke ich für die Anregung und sein Interesse an dieser Arbeit. Ebenso bin ich dankbar für seine humanistische Hilfsbereitschaft.

Weiterhin gilt mein Dank Herrn prof. Dr. Berndt Müller für viele wertvolle Ratschläge und lehrreiche kritische Bemerkungen.

Auch Herrn Dr. Joachim Reinhardt, der mir durch gründliche Diskussion viel geholfen hat, möchte ich an dieser Stelle danken.

Meinen Kollegen im Institut, insbesondere den Herren Dr. Uhlrich Heinz, Udo Müller, Theo de Reus und Karl Depta, danke ich für viele hilfreiche Diskussionen und für die vielen ermutigenden Worte, ohne die diese Arbeit nie fertig geworden wäre.

Bei den Herren Dr. Josef Hahn, Wolfram Schmidt und Andre Paulus möchte ich mich bedanken für die angenehme Atmosphäre im gemeinsamen Arbeitszimmer und - bei den beiden letzten Herren - für die große Mühe, die sie aufwandten, um diese Arbeit in verständliches Deutsch zu fassen.

Der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) danke ich für die zur Verfügung gestellte Rechenzeit.

Ein herzliches Dankeschön Frau B. Utschig für das Ausführen der Zeichnungen und Herrn Ph. Holzmann für den Druck der Arbeit.

Ich danke meinen Eltern, die mir das Studium ermöglicht haben, für ihre Mühen und Sorgen. Ganz besonderen Dank schulde ich meiner Frau Anna, die - insbesondere während der letzten Phase meiner Arbeit - immer viel Geduld und Verständnis gezeigt hat.

Es ist mir eine besondere Verpflichtung, mich an dieser Stelle bei allen Menschen zu bedanken, die durch ihre Hilfe unseren Neuanfang in Deutschland erleichtert und dadurch (überhaupt erst) diese Arbeit ermöglicht haben. Mir ist es unmöglich, alle Namen aufzuzählen. Mit besonderer Bedeutung bleiben die folgenden Namen in unserer Erinnerung: Herr Reinhard Manthey und seine Frau Ute, Herr Prof. Dr. Johannes Hoffmann und seine Frau Maria, Herr Pfarrer Gyula Cseri und seine Frau Pfarrerin Katalin, Herr Pfarrer Tibor Sipos und seine Frau Agens Dr. und Herr Prof. Dr. György Targonszki.

Literaturverzeichnis

- (Al. 81 a) Y. Alhassid, B. Müller and S. E. Koonin, "Mean-field approximation for inclusive observables", Phys. Rev. C 23 (1981) 487 - 491
- (Al. 81 b) Y. Alhassid and S. E. Koonin, "Mean-field approximation to the many-body S matrix", Phys. Rev. C 23 (1981) 1590
- (Ambr. 70) M. Abramowitz and I. A. Stegun, "Handbook of Mathematical Functions", Dover 1970
- (Bal. 81) R. Balian and M. Vénéroni, Phys. Rev. Lett. 47 (1981) 1353
- (Bar. 49) M. S. Barlett and J. E. Moyal, "The Exact Transition Probabilities of Quantum Mechanical Oscillators Calculated by the Phase Space Method", Proc. Cambridge Phil. Soc. 45 (1949) 545
- (Be. 72) M. V. Berry and K. E. Mount, "Semiclassical Approximation in Wave Mechanics", Rep. Prog. Phys. 35 (1972) 315 - 397
- (Be. 76) M. V. Berry, Adv. Phys. 25 (1976) 1
- (Bri. 79) D. M. Brink, F. Neto and H. A. Weidenmüller, "Transport Coefficients for Deeply Inelastic Scattering from the Feynman Path Integral Method", Phys. Lett. 80 B (1979) 170 - 175
- (Bru. 61) S. G. Brush, "Functional Integrals and Statistical Physics", Rev. Mod. Phys. 33 (1961) 79 - 92
- (Ca. 71) P. Camiz, A. Gerardi, C. Marchioro, E. Presutti and E. Scacciatelli, "Exact Solution of a Time Dependent Quantal Harmonic Oscillator with a Singular Perturbation", J. Math. Phys. 12 (1971) 2040 - 2043

- (Cho. 55) P. Choquard, Helv. Phys. Acta, 28 (1955) 89 - 157
- (Chi. 74) M. S. Child, "Molecular Collision Theory", Academic Press, New York 1974
- (Chi. 78) M. S. Child, "Semiclassical Effects in Heavy-Particle Collisions", Advances in Atomic and Molecular Physics, Vol. 14, 225 - 280; Academic Press, New York 1978
- (Co. 61) T. L. Cottrell and F. M. McCoubrey, "Molecular Energy Transfer in Gases"; Butterworths, London 1961
- (Da. 63) H. Davis, Proc. Cambridge Phil. Soc. 59 (1963) 147
- (Daw. 78) A. S. Dawidow, "Quantenmechanik", VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1978
- (Fe. 48) R. P. Feynman, "Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics", Rev. Mod. Phys. 20 (1948) 367 - 387
- (Fe. 63) R. P. Feynman and F. L. Vernon, Jr., "The Theory of a General Quantum System Interacting with a Linear Dissipative System", Ann. Phys. 24 (1963) 118 - 173
- (Fe. 65) R. P. Feynman and A. R. Hibbs, "Quantum Mechanics and Path Integrals", McGraw - Hill, New York 1965
- (Fo. 59 a) K. W. Ford and J. A. Wheller, "Application of Semiclassical Scattering Analysis", Ann. Phys. 7 (1959) 287 - 322
- (Fr. 72) K. F. Freed, "Path Integrals and Semiclassical Tunneling, Wavefunctions, and Energies", J. Chem. Phys. 56 (1972) 692-697
- (Ga. 66) C. Garrod, "Hamiltonian Path-Integral Methods", Rev. Mod. Phys. 38 (1966) 483 - 494

- (Go. 72) M. J. Goovaerts and J. T. Devreese, "Analytic Treatment of the Coulomb Potential in the Path Integral Formalism by Exact Summation of a Perturbation Expansion", J. Math. Phys. 13 (1972) 1070 - 1082
- (Go. 73) M. J. Goovaerts, A. Baccenco and J. T. Devreese, "A new expansion method in the Feynman path integral formalism: Application to a one-dimensional deltafunction potential", J. Math. Phys. 11 (1973) 554 - 559
- (Gre. 83) W. Greiner, "The Decay of the Vacuum in Supercritical Fields of Giant Nuclear Systems", Invited talk at the International Conference on Nuclear Physics, Florence 1983
- (Ham. 83) J. H. Hamilton and W. Greiner, "Frontiers in Nuclear Science", Portugal. Phys. 14 (1983) 1 - 47
- (He. 83 a) U. Heinz, B. Müller and W. Greiner, "Quantum Mechanical Treatment of Electron-Positron Excitations in Heavy Ion Collisions with Nuclear Contact", J. W. Goethe-Universität Frankfurt, Vordruck (1983)
- (He. 83 b) U. Heinz, J. Reinhardt, B. Müller, W. Greiner and W. T. Pinkston, "Quantum Mechanics of the Time-Structure in Heavy Ion Collisions with Nuclear Contact", J. W. Goethe-Universität Frankfurt, Vordruck (1983)
- (He. 83 c) U. Heinz, "Das Wechselspiel zwischen Atom- und Kernphysikalischen Anregungen in Schwerionenstößen mit Kernkontakt", J. W. Goethe-Universität Frankfurt, Habilitationsschrift (1983)

- (Kh. 75) D. C. Khandekar and S. V. Lawande, "Exact Propagator for a time-dependent harmonic oscillator with and without a singular perturbation", J. Math. Phys. 16 (1975)
- (Kn. 73) J. Knoll and R. Schaeffer, "Extended Seminar on Nuclear Physics", ICTP Trieste, 1973
- (Kn. 76) J. Knoll and R. Schaeffer, "Semiclassical Scattering Theory with Complex Trajectories I.", Elastic Waves Ann., Phys. 97 (1976) 307
- (Koel. 75) T. Koeling and R. A. Malfliet, "Semi-classical Approximations to Heavy Ion Scattering Based on the Feynman Path-Integral Method", Phys. Reports, C 22 (1975) 181 - 213
R. A. Malfliet, "Semi-classical Description of Elastic and Inelastic Heavy Ion Scattering", Lectures Notes in Physics Vol. 33, 86 - 101, Springer Verlag, Berlin 1975
- (Kr. 82) F. Krisztinkovics, J. Reinhardt, B. Müller and W. Greiner, "The Semiclassical Approximation for Inelastic Scattering", GSI Jahresbericht 1982 (GSI Darmstadt 1983)
- (Kr. 83 a) F. Krisztinkovics, J. Reinhardt, and B. Müller, "The Semiclassical Approximation for Inelastic Scattering Processes", J. W. Goethe-Universität Frankfurt, Vordruck (1983)
- (Kr. 83 b) F. Krisztinkovics, J. Reinhardt, B. Müller and W. Greiner, "Study of a Self-Consistent Method for Semiclassical Heavy Ion Scattering", Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Spring Meeting Münster 1983
- (Kr. 84) F. Krisztinkovics, "On the derivation of semiclassical trajectories for inclusive transitions" in Vorbereitung

- (Le. 74) S. Levit, U. Smilansky and D. Pelte, "A New Semiclassical Theory for Multiple Coulomb Excitations", Phys. Lett. 53 B (1974) 39 - 44
- (Le. 77 a) S. Levit and U. Smilansky, "A New Approach to Gaussian Path Integrals and the Evaluation of the Semiclassical Propagator", Ann. Phys. 103 (1977) 198 - 207
- (Le. 77 b) S. Levit and U. Smilansky, "The Hamiltonian Path Integrals and the Uniform Semiclassical Approximations for the Propagator", Ann. Phys. 108 (1977) 165 - 197
- (Le. 80 a) S. Levit, Phys. Rev. C 21 (1980) 1594
- (Le. 80 b) S. Levit, J. W. Negele and Z. Paltiel, "Time-dependent mean-field theory and quantized bound states", Phys. Rev. C 21 (1980) 1603 - 1625
- (Le. 80 c) S. Levit, J. W. Negele and Z. Paltiel, "Barrier penetration and spontaneous fission in the time-dependent mean-field approximation", Phys. Rev. C 22 (1980) 1979
- (Mad. 64) E. Madelung, "Die Mathematischen Hilfsmittel des Physikers", Siebente Auflage, Springer Verlag, Berlin 1964
- (Mag. 54) W. Magnus, Commun. Pure. Appl. Math. 7 (1954) 649
- (Mar. 80) M. S. Marinov, "Path Integrals in Quantum Theory: An Outlook of Basic Concepts", Phys. Reports, C 60 (1980) 1 - 57
- (Mas. 74) H. Massmann and J. O. Rasmussen, "Uniform Semiclassical Orbital Calculations of Heavy Ion Coulomb Excitation", Nucl. Phys. A 243 (1975) 155 - 174
- (McLa. 72 a) D. W. Mc Laughlin, "Path Integrals, Asymptotics, and Singular Perturbations", J. Math. Phys. 13 (1972) 784 - 796

- (McLa. 72 b) D. W. Mc Laughlin, "Complex Time, Coutour Independent Path Integrals, and Barrier Penetration"; J. Math. Phys. 13 (1972) 1099 - 1108
- (Me. 76) A. Messiah, "Quantenmechanik", Band 1, de Gruyter, Berlin - New York 1976
- (Mi. 70 a) W. H. Miller, "Semiclassical Theory of Atom-Diatom Collisions: Path Integrals and the Clasical S Matrix", J. Chem. Phys. 53 (1970) 1949 - 1959
- (Mi. 70 b) W. H. Miller, "Classical S Matrix: Numerical Application to Inelastic Collisions", J. Chem. Phys. 53 (1970) 3578 - 3587
- (Mi. 72) W. H. Miller and Th. F. George, "Analytic Continuation of Classical Mechanics for Classically Forbidden Collision Processes", J. Chem. Phys. 56 (1972) 5668 - 5681
- (Mi. 74) W. H. Miller, "Classical-Limit Quantum Mechanics and the Theory of Molecular Collisions", Adv. Chem. Phys. 25 (1974) 69 - 177
- (Mö. 80) K. Möhring and U. Smilansky, "A Semiclassical Treatment of Dissipative Processes Based on Feynman's Influence Functional Method", Nucl. Phys. A 338 (1980) 227 - 268
- (Mö. 81) K. Möhring and U. Smilansky, "Semiclassical evaluation of Inclusive Transition Probabilities", J. Chem. Phys. 74 (1981) 4509 - 4518
- (More. 51) C. Morette, "On the Definition and Approximation of Feynman's Path Integrals", Phys. Rev. 81 (1951) 848 - 852
- (Mors. 53) P. M. Morse - H. Feshbach, "Methods of Theoretical Physics", McGraw-Hill, New York 1953

- (Mü. 62) B. Mühlischlegel, "Asymptotic Expansion of the Bardeen-Cooper-Schriffer Partition Function by Means of the Functional Method", J. Math. Phys. 3 (1962) 522 - 530
- (Ne. 82) J. W. Negele, "The mean-field theory of nuclear structure and dynamics", Rev. Mod. Phys. 54 (1982) 913 - 1015
- (Pe. 66) P. Pechukas and J. C. Light, "On the Exponential Form of Time-Displacement Operators in Quantum Mechanics", J. Chem. Phys. 41 (1966) 3897 - 3912
- (Pe. 69 a) P. Pechukas, "Time-Dependent Semiclassical Scattering Theory, I. Potential Scattering", Phys. Rev. 181 (1969) 166 - 174
- (Pe. 696) P. Pechukas, "Time-Dependent Semiclassical Scattering Theory, II. Atomic Collisions", Phys. Rev. 181 (1969) 174 - 185
- (Pe. 71) P. Pechukas, J. Chem. Phys. 54 (1971) 3864 - 3873
- (Pe. 72 a) P. Pechukas and J. P. Davis, J. Chem. Phys. 56 (1972) 4970
- (Pe. 72 b) P. Pechukas, J. Chem. Phys. 57 (1972) 5577
- (Pe. 76) P. Pechukas and M. S. Child, Mol. Phys. 31 (1976) 973 - 987
- (Pen. 73) A. P. Perner and R. Wallace, "Semiclassical Collision Theory within the Feynman Path-Integral Formalism I, Phys. Rev. A 7 (1973) 1007 - 1015
- (Pen. 74) A. P. Perner and R. Wallace, "Semiclassical Collision Theory within the Feynman Path-Integral Formalism II", Phys. Rev. A 9 (1974) 1136 - 1142
- (Pen. 75) A. P. Penner and R. Wallace, "Semiclassical Normalisation of a Path-Integral for a Multichannel Scattering Problem", Phys. Rev. A 11 (1975) 149 - 153

- (Re. 84) J. Reinhardt and W. Greiner, "Heavy Ion Atomic Physics", in Heavy Ion Sciences Ed. by D. A. Bromley, Plenum Press 1984
- (Rh. 83) M. J. Rhoades-Brown, V. E. Oberacker, M. Seiwert und W. Greiner, Z. Phys. A 310 (1983) 287
- (Ro. 32) N. Rosen and C. Zener, "Double Stern-Gerlach Experiment and Related Collisions Phenomena", Phys. Rev. 40 (1932) 502
- (Schu. 81) L. S. Schulman, "Techniques and Applications of Path Integration", John Wiley, New York 1981
- (Schw. 64) J. Schwinger, "Coulomb Green's Function", J. Math. Phys. 5 (1964) 1606 - 1608
- (Se. 82) M. Seiwert, N. Abou-El-Naga, V. E. Oberacker, J. A. Maruhn und W. Greiner, - GSI Jahresbericht 1981 (GSI Darmstadt 1982)
- (Se. 84) M. Seiwert, W. Greiner and W. T. Pinkston, J. W. Goethe-Universität Frankfurt, Vor-druck (1984)
- (Ta. 63) K. Takayanagi, "Vibrational and Rotational Transitions in Molecular Collisions", Progr. Theoret. Phys. (Kyoto) Suppl. 25 (1963) 1 - 98
- (Tob. 56) W. Toboeman, Nuovo Cimento 3 (1956) 1213
- (Tom. 82) T. Tomoda and A. Sevgen, "Path Integral Approach to Nuclear Pairing Field", Z. Phys. A 304 (1982) 221
- (Vle. 28) J. H. Van Vleck, Proc. Natl. Acad. Sci. 14 (1928)
- (Weid. 80) H. A. Weidenmüller, Progress in Particle and Nuclear Physics, Ed. by D. Wilkinson, Pergamon Press, London 1980
- (Weiz. 62) W. Weizel, "Physikalische Formelsammlung", Erster Band, Bibliographisches Institut, Mannheim 1962

- (Wi. 74) C. B. Willis and R. H. Picard, "Time-dependent projection-operator approach to master equations for coupled systems", Phys. Rev. A 9 (1974) 1343 -1358
- (Yo. 74) S. Yoshida, "Time Description of Nuclear Reactions", Ann. Revs. Nucl. Part. Sci. 24 (1974) 1 - 33

